

Technische Universität Ilmenau
Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften

Dielektrische Funktion und elektrooptische Eigenschaften von (Al,Ga)N/GaN-Heterostrukturen

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt von Dipl.-Ing. Carsten Buchheim
geb. am 07.04.1978 in Dresden

Gutachter:

Prof. Dr. R. Goldhahn (TU Ilmenau/Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg)

Prof. Dr. N. Esser (Institute for Analytical Sciences Berlin)

Prof. Dr. M. Eickhoff (Justus-Liebig-Universität Gießen)

Einreichung: 19.10.2009

öffentliche Aussprache: 23.04.2010

urn:nbn:de:gbv:ilm1-2010000168

Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit werden umfangreiche Untersuchungen an Nitridhalbleitern mittels optischer Spektroskopie vorgestellt.

Es werden erstmalig sowohl die ordentliche als auch die außerordentliche Komponente der dielektrischen Funktion von GaN über einen ausgedehnten Spektralbereich von 1,2 bis 9,8 eV gezeigt. Es wird demonstriert, daß auch der transparente Spektralbereich deutlich durch hochenergetische kritische Punkte der Bandstruktur beeinflusst wird. Unter Berücksichtigung der Verspannung werden die optischen Auswahlregeln für GaN und AlN verifiziert. Die Umkehr der Valenzbandreihenfolge bei AlN im Gegensatz zu GaN wird nachgewiesen sowie die Kristallfeldenergie für AlN abgeschätzt. Für AlGaN gelingt es, die ordentliche dielektrische Funktion für verschiedene Al-Gehalte zu bestimmen und daraus ein analytisches Modell für deren Berechnung bei beliebiger Mischkristallzusammensetzung abzuleiten. Hierbei werden exzitonische Effekte sowie Nichtlinearitäten in den Abhängigkeiten berücksichtigt.

(GaN/AlGa)N/GaN-Heterostrukturen werden mit Spektrellipsometrie und anschließend mittels Photo- bzw. Elektreflexion untersucht. Aus den optischen Daten werden die elektrischen Feldstärken der einzelnen Schichten ermittelt, um daraus die Dichten der an den Heterogrenzflächen auftretenden zweidimensionalen Ladungsträrgase mit großer Genauigkeit zu bestimmen. Durch die Kombination der Experimente mit selbstkonsistenten Schrödinger-Poisson-Rechnungen können die Oberflächenpotentiale berechnet werden. Die Abhängigkeit vom Al-Gehalt wird quantifiziert. Für den Spezialfall dicker Deckschichten wird erstmals der experimentelle Nachweis für die Koexistenz von zweidimensionalen Elektronen- und Löchergasen innerhalb einer Probe erbracht.

Bei AlN/GaN-Supergittern werden verschiedene Interbandübergänge zwischen quantisierten Zuständen mittels Elektreflexion beobachtet. Durch den Vergleich mit quantenmechanischen Rechnungen wird der Einfluß der Verspannung und der ihrerseits verspannungsabhängigen elektrischen Feldstärken (Quantenstarkeffekt) deutlich. Für beide Parameter hat das Schichtdickenverhältnis von Quantengraben und Barrieren eine wichtige Bedeutung. Aus der Bestimmung der dielektrischen Funktion der Supergitter wird ersichtlich, daß in derartigen Strukturen auch höherenergetische kritische Punkte der Bandstruktur von Quanteneffekten geprägt sind.

Abstract

In this work extensive investigations on nitride semiconductors by optical spectroscopy are presented.

The ordinary and the extraordinary component of the dielectric function of GaN in the spectral range from 1.2 to 9.8 eV is shown for the first time. It will be demonstrated, that the transparent spectral range is clearly influenced by higher energetic critical points of the band structure. The optical selection rules for GaN and AlN are verified considering the actual strain state. The change of the valence band ordering of AlN in comparison to GaN is proven and the crystal field splitting is estimated for AlN. The ordinary dielectric function of AlGa_xN_{1-x} is determined for different Al contents. The data are used for developing an analytical model, which includes excitonic effects and bowings. It allows the calculation of the dielectric function for arbitrary alloy compositions.

(GaN/AlGa_xN_{1-x}/GaN heterostructures are investigated by spectroscopic ellipsometry as well as by photoreflectance and electroreflectance. The optical data yields the electric field strengths of the individual layers to determine the density of the two-dimensional carrier gases at the heterointerfaces with high accuracy. The surface potential is calculated from the combination of experiments and Schrödinger-Poisson calculations. Its dependency on the Al content is quantified. For the special case of thick cap layers the coexistence of electron and hole gases in one sample is experimentally proven for the first time.

Several interband transitions between quantized states in AlN/GaN superlattices are observed by electroreflectance. The comparison to quantum mechanical calculations demonstrates the influence of strain and electrical fields (quantum confined Stark effect). For both the ratio of the thicknesses of quantum wells and barriers is crucial. From the dielectric function of the superlattices it becomes obvious, that quantum size effects are not only important for the vicinity of the bandgap, but also play a significant role for higher energetic critical points of the band structure.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	12
2	Dielektrische Funktion von Nitridhalbleitern	15
2.1	Bandstruktur	15
2.2	Dielektrische Funktion	24
3	Polarisationseigenschaften von Nitridhalbleitern	26
3.1	Spontane Polarisation	26
3.2	Piezoelektrische Polarisation	30
3.3	Zweidimensionale Elektronen- und Löchergase	33
4	Optische Untersuchungsmethoden	35
4.1	Spektroskopische Ellipsometrie	35
4.1.1	Theoretische Grundlagen	35
4.1.2	Experimenteller Aufbau	39
4.2	Photolumineszenz	42
4.3	Elektroreflexion	44
4.3.1	Prinzip der Elektroreflexion	44
4.3.2	Experimenteller Aufbau	46
4.3.3	Auswertung der ER-Spektren	47
4.4	Photoreflexion	52
4.4.1	Grundlagen	52
4.4.2	Experimenteller Aufbau	52
5	Probenstrukturen	54
5.1	Volumenmaterial	54
5.2	Heterostrukturen	56
5.3	Supergitter	59

6	Experimentelle Ergebnisse - Volumenmaterial	62
6.1	Dielektrische Funktion von (Al)GaN(0001)	63
6.1.1	GaN(0001)	63
6.1.2	AlGaN(0001)	72
6.1.3	Analytisches Modell	79
6.2	Dielektrische Funktion von GaN(11 $\bar{2}$ 0)	83
6.2.1	Bandkantennaher Bereich	83
6.2.2	Hochenergetischer Bereich	89
6.2.3	Vergleich von isotropem und anisotropem Modell	93
6.3	Dielektrische Funktion von AlN(11 $\bar{2}$ 0)	94
7	Experimentelle Ergebnisse - Heterostrukturen	99
7.1	AlGaN/GaN-Heterostrukturen	99
7.2	GaN/AlGaN/GaN-Heterostrukturen	108
7.2.1	Heterostrukturen mit dünner GaN-Deckschicht	108
7.2.2	Heterostrukturen mit dicker GaN-Deckschicht	116
7.3	AlN/GaN-Supergitter	126
7.3.1	Spektralellipsometrie	127
7.3.2	Photolumineszenz und Modulationsspektroskopie	130
7.3.3	Quantenmechanische Berechnungen	135
8	Zusammenfassung und Ausblick	142
	Literaturverzeichnis	145
	Danksagung	157

Im Rahmen der Promotion veröffentlichte Arbeiten

- [1] R. Goldhahn, C. Buchheim, P. Schley, A. T. Winzer, H. Wenzel, *Optical constants of wurtzite group-III nitride semiconductors*, in J. Piprek (Hg.), Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulation, 95–115 (Wiley-VCH, Weinheim, 2007).
- [2] R. Goldhahn, C. Buchheim, V. Lebedev, V. Cimalla, O. Ambacher, C. Cobet, M. Rakel, N. Esser, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, S. Potthast, D. J. As, *Dielectric function and critical points of the band structure for hexagonal and cubic GaN and AlN*, in K. Godehusen (Hg.), BESSY Highlights 2004: Annual Report, 206–208 (Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung m.b.H., 2005), ISSN-Nummer: 1611-6127.
- [3] C. Buchheim, R. Goldhahn, M. Rakel, C. Cobet, N. Esser, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, *Dielectric function and critical points of the band structure for AlGaN alloys*, phys. stat. sol. (b) **242**, 2610 (2005).
- [4] C. Buchheim, R. Goldhahn, A. T. Winzer, C. Cobet, M. Rakel, N. Esser, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, O. Ambacher, *Critical points of the bandstructure of AlN/GaN superlattices investigated by spectroscopic ellipsometry and modulation spectroscopy*, phys. stat. sol. (c) **3**, 2009 (2006).
- [5] C. Buchheim, R. Goldhahn, A. T. Winzer, G. Gobsch, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, F. Furtmayr, M. Eickhoff, *Stark shift of interband transitions in AlN/GaN superlattices*, Appl. Phys. Lett. **90**, 241906 (2007).
- [6] C. Buchheim, R. Goldhahn, G. Gobsch, K. Tonisch, V. Cimalla, F. Niebelschütz, O. Ambacher, *Electric field distribution in GaN/AlGaIn/GaN heterostructures with two-dimensional electron and hole gas*, Appl. Phys. Lett. **92**, 013510 (2008).
- [7] K. Tonisch, C. Buchheim, F. Niebelschütz, M. Donahue, R. Goldhahn, V. Cimalla, O. Ambacher, *Piezoelectric actuation of all-nitride MEMS*, phys. stat. sol. (c) **5**, 1910 (2008).
- [8] K. Tonisch, C. Buchheim, F. Niebelschütz, A. Schober, G. Gobsch, V. Cimalla, O. Ambacher, R. Goldhahn, *Piezoelectric actuation of (GaN)/AlGaIn/GaN heterostructures*, J. Appl. Phys. **104**, 084516 (2008).

- [9] C. Buchheim, M. Röppischer, R. Goldhahn, G. Gobsch, C. Cobet, C. Werner, N. Esser, A. Dadgar, M. Wieneke, J. Bläsing, A. Krost, *Influence of anisotropic strain on excitonic transitions in a-plane GaN*, Microelectronics J. **40**, 322 (2009).
- [10] (Editor's Choice) M. Röppischer, R. Goldhahn, C. Buchheim, F. Furtmayr, T. Wassner, M. Eickhoff, C. Cobet, N. Esser, *Analysis of polarization-dependent photorefectance studies for c-plane GaN films on a-plane sapphire*, phys. stat. sol. (a) **206**, 773 (2009).
- [11] P. Waltereit, S. Müller, K. Bellmann, C. Buchheim, R. Goldhahn, K. Köhler, L. Kirste, M. Baeumler, M. Dammann, W. Bronner, R. Quay, O. Ambacher, *Impact of GaN thickness on optical, electrical, and device properties in Al-GaN/GaN high electron mobility transistor structures*, J. Appl. Phys. **106**, 023535 (2009).
- [12] K. Köhler, S. Müller, R. Aidam, P. Waltereit, W. Pletschen, L. Kirste, H. P. Menner, W. Bronner, A. Leuther, R. Quay, M. Mikulla, O. Ambacher, R. Granzner, F. Schwierz, C. Buchheim, R. Goldhahn, *Influence of the surface potential on electrical properties of $Al_xGa_{1-x}N$ /GaN heterostructures with different Al-content: Effect of growth method*, J. Appl. Phys. **107**, 053711 (2010).

Zur Veröffentlichung eingereichte Arbeiten

- [13] P. Waltereit, W. Bronner, R. Quay, M. Damman, S. Müller, K. Köhler, M. Mikulla, O. Ambacher, L. Harm, M. Lorenzini, T. Rödle, K. Riepe, K. Bellmann, C. Buchheim, R. Goldhahn, *Development of rugged 2 GHz power bars delivering more than 100 W and 60% power added efficiency*, phys. stat. sol. (a) (eingereicht).
- [14] W. Pletschen, S. Müller, K. Köhler, R. Kiefer, L. Kirste, C. Buchheim, R. Goldhahn, R. Quay, M. Mikulla, O. Ambacher, *Influence of surface conditions on the properties of GaN/ $Al_xGa_{1-x}N$ HEMT structures*, phys. stat. sol. (c) (eingereicht).

Abkürzungsverzeichnis

2DEG	zweidimensionales Elektronengas
2DHG	zweidimensionales Löchergas
CPBS	kritischer Punkt der Bandstruktur
D ⁰ X	donatorgebundenes Exziton
DF	dielektrische Funktion
ER	Elektroreflexion
FKO	Franz-Keldysh-Oszillation
FX	freies Exziton
GF	Grenzfläche
HEMT	Transistor mit hoher Elektronenbeweglichkeit
HVPE	Hydridgasphasenepitaxie
LB	Leitungsband
LD	Laserdiode
LED	Leuchtemitterdiode
MEMS	mikroelektromechanische Systeme
MOVPE	metallorganische Gasphasenepitaxie
NEMS	nanoelektromechanische Systeme
OF	Oberfläche
PAMBE	plasmaunterstützte Molekularstrahlepitaxie
PL	Photolumineszenz
PR	Photoreflexion
RT	Raumtemperatur
SE	Spektralellipsometrie
SL	Supergitter
UHV	Ultrahochvakuum
VB	Valenzband
WF	Wellenfunktion

Symbolverzeichnis

Ai	Airyfunktion
a	Gitterkonstante in $(11\bar{2}0)$ -Richtung
Bi	modifizierte Airyfunktion
b	Durchbiegungsparameter
$C_{ij(kl)}$	elastische Konstanten
c	Gitterkonstante in (0001) -Richtung
c_0	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum, unverspannte Gitterkonstante in (0001) -Richtung
D_i	Deformationspotentiale des Valenzbandes
$d_{b,c,w}$	Dicke von Barriere, Deckschicht, Quantengraben
$d_{ij(k)}$	piezoelektrische Module
\vec{E}	elektrische Feldstärke der elektromagnetischen Welle
E_b	Bindungsenergie
$E_{C,V}$	Energie des Leitungs-, Valenzbandes
E_g	Bandlücke
e	Elementarladung
$F_{b,c,w}$	elektrische Feldstärke von Barriere, Deckschicht, Quantengraben
f	Oszillatorstärke
\mathcal{F}, \mathcal{G}	elektrooptische Funktionen
\mathcal{H}	Heavyside-Stufenfunktion
$\hbar\Theta$	elektrooptische Energie
$\Im m$	Imaginärteil
\vec{k}, k	Wellenvektor, -zahl
m_0	freie Elektronenmasse
m_e	effektive Elektronenmasse
$m_{hh, lh}$	effektive Masse der schweren, leichten Löcher
$\bar{N}(\omega)$	komplexer Brechungsindex
$N_{2DEG, 2DHG}$	Flächenladungsdichte des 2DEG, 2DHG
$n(\omega), \kappa(\omega)$	Real-, Imaginärteil des Brechungsindex
\vec{p}	Impulsvektor
P^{PZ}	piezoelektrische Polarisation
P^{SP}	spontane Polarisation
R	Reflektivität
$\Re e$	Realteil

$\hat{r}_{i(j)}$	Fresnelkoeffizient der Reflexion
T	Temperatur
$\hat{t}_{i(j)}$	Fresnelkoeffizient der Transmission
$U_{ac,dc}$	Wechsel-, Gleichspannung
$U_{k,th}$	Knick-, Schwellspannung
x	Al-Gehalt
x, y, z	Raumrichtungen
α_{cz}, α_{ct}	Deformationspotentiale des Leitungsbandes
$\alpha(\omega)$	Absorptionskoeffizient
β	Phasendicke
Δ	ellipsometrischer Parameter
$\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3$	Valenzbandparameter
Δ_{cr}	Kristallfeldaufspaltung
Δ_{so}	Spin-Bahn-Aufspaltung
ϵ_{kl}	Verzerrung
$\hat{\epsilon}_{o,e}$	komplexe dielektrische Funktion (ordentlich, außerordentlich)
$\langle \hat{\epsilon} \rangle$	pseudodielektrische Funktion
ϵ_1, ϵ_2	Real-, Imaginärteil der dielektrischen Funktion
ϵ_0	Dielektrizitätskonstante des Vakuums
ϵ_r	relative statische Dielektrizitätskonstante
μ	effektive Interbandmasse
ρ_P	Polarisationsladungsdichte
σ_{ij}	mechanische Spannung
σ_{OF}	Nettoflächenladungsdichte der Oberfläche
σ_P	Polarisationsflächenladungsdichte
σ_{ss}	Flächenladungsdichte von Oberflächenzuständen
Ψ	ellipsometrischer Parameter

Kapitel 1

Einleitung

Die Eigenschaften von Nitridhalbleitern (GaN, AlN, InN und ihre Mischkristalle) werden seit über 40 Jahren untersucht. Da es an Volumenkristallen mit entsprechend guter Kristallqualität und geringer Ladungsträgerdichte fehlt, ist man dabei in der Regel auf dünne Schichten auf einem Fremdsubstrat angewiesen. Mit dem technologischen Fortschritt bei den Abscheidetechnologien, wie der metallorganischen Gasphasenepitaxie (MOVPE), der plasmaunterstützten Molekularstrahlepitaxie (PAMBE) und der Hydridgasphasenepitaxie (HVPE), können inzwischen hochwertige Schichten auf Saphir, SiC und Si hergestellt werden. Damit erschlossen sich vor allem im letzten Jahrzehnt zahlreiche Anwendungsfelder, die das Interesse an diesem Materialsystem stark ansteigen ließen.

Die große Bandlücke der Materialien ermöglicht den Bau von Leuchtdioden (LED) [15–18] und Laserdioden (LD) [19, 20] für den sichtbaren bis ultravioletten Spektralbereich. Ein Einsatzgebiet sind z.B. die 405 nm-Laser in sogenannten Blu-ray-Disc-Geräten. Ebenso können solarblinde UV-Detektoren hergestellt werden [21–23]. Langperiodische Supergitter-Strukturen dienen als Bragg-Reflektoren [24]. Kurzperiodische finden als Infrarotdetektoren [25] und -emitter auf der Basis von Intersubbandübergängen Verwendung. Auch Quantenkaskadenlaser können realisiert werden [26]. Der Bandabstand der Materialien verhindert die ungewollte optische und thermische Generation von Ladungsträgern. Gepaart mit einer hohen Temperaturbeständigkeit erlaubt dies den Bau von Hochtemperaturgassensoren [27]. Die hohen Durchbruchfeldstärken und Sättigungsgeschwindigkeiten der Elektronen sowie die großen Leitungsbanddiskontinuitäten zwischen den verschiedenen Gruppe-III-Nitriden lassen die Eignung als Transistoren mit hoher Elektronenbeweglichkeit (HEMT) erkennen. Die gute thermische Leitfähigkeit und die erprobte Abscheidung auf SiC gewährleisten die Realisierung von Hochleistungsbauelementen für die Hochfrequenztechnik, ohne ein zu starkes Aufheizen des Materials befürchten zu müssen [28–34]. Eine Besonderheit von Heterostrukturen auf der Basis von Gruppe-III-

Nitriden ist die Ausbildung zweidimensionaler Elektronengase (2DEG) an den Heterogrenzflächen auch ohne zusätzliches Dotieren des Materials. Der Grund hierfür sind die pyroelektrischen Eigenschaften der Nitridhalbleiter, die in Kapitel 3 beschrieben werden. Sie werden in mikro- und nanoelektromechanischen Systemen (MEMS/NEMS) ausgenutzt [7, 8]. Neue Anwendungen ergeben sich auch durch Oberflächenmodifikationen von Transistorstrukturen [35–38] für Untersuchungen an kleinen Flüssigkeitsmengen [39] oder die Beobachtung von Zellaktivitäten [40, 41].

Aktuelle Übersichten über die vielfältigen Einsatzmöglichkeiten von Nitridhalbleitern finden sich in [42–45].

Die Vielzahl an Anwendungen macht eine umfangreiche Charakterisierung der Materialeigenschaften und probenspezifischen Parameter unumgänglich. Bei optoelektronischen Bauelementen sind oft Wellenleiter- oder Resonatorstrukturen erforderlich. Voraussetzung für deren Dimensionierung ist die genaue Kenntnis der dielektrischen Funktion (DF). Diese ist bei hexagonalen Nitridhalbleitern anisotrop. Es existiert eine optische Achse entlang der c -Achse der Kristalle, so daß eine ordentliche und eine außerordentliche DF zu bestimmen sind. Sie entsprechen der Ausrichtung des elektrischen Feldes \vec{E} senkrecht und parallel zur optischen (c -)Achse. Leider sind experimentelle Daten rar. Sie sind oft auf den transparenten Bereich [46] oder die ordentliche DF beschränkt [3, 47]. Daher ist ein wesentliches Ziel dieser Arbeit die Bestimmung der DF von GaN, AlN und ihren Mischkristallen über einen ausgedehnten Spektralbereich unter Berücksichtigung der Anisotropie. Zu ergründende Teilaspekte betreffen die Reihenfolge der Valenzbänder, die Wirkung von Verspannungen auf die Energie der exzitonischen Übergänge sowie deren Oszillatorstärken und den Einfluß der Elektron-Loch-Wechselwirkung auf die dielektrische Funktion fernab der Bandkante.

Bei Heterostrukturen aus Nitridhalbleitern spielen Polarisierungseffekte eine wichtige Rolle. Sie hängen vom Al-Gehalt und der Verspannung ab und schlagen sich in bauelementerelevanten Größen wie den elektrischen Feldstärken und den Flächenladungsträgerdichten von Elektronen- bzw. Löchergasen nieder. Um Heterostrukturen realitätsgetreu modellieren zu können, leisten Experimente einen entscheidenden Beitrag. Ebenso sind z.B. wirklichkeitsnahe Annahmen bezüglich des Oberflächenpotentials zu treffen. Die optische Spektroskopie, insbesondere die Modulationsspektroskopie, kann einen entscheidenden Anteil zur Bestimmung aller relevanten Parameter leisten. Dies gilt es in dieser Arbeit zu demonstrieren. Im Vordergrund soll dabei der Einfluß der Deckschicht stehen.

Kurzperiodische Supergitter (SL) stellen einen Spezialfall der Heterostruktur dar. An ihnen läßt sich eindrucksvoll das polarisationsbedingte Wechselspiel von Verspannung und elektrischen Feldstärken beobachten. Es soll gezeigt werden, wie die umfangreiche optische

Charakterisierung in Abhängigkeit von den Schichtdicken im Zusammenhang mit theoretischen Berechnungen wachstums- und baulementerrelevante Aussagen über Supergitter ermöglicht.

Die genannten Punkte werden in dieser Arbeit behandelt, wobei die einzelnen Kapitel teilweise auf den Erkenntnissen der vorangegangenen aufbauen. Kapitel 2 ist der Bandstruktur von Nitridhalbleitern und der sich daraus ableitenden DF gewidmet. Kapitel 3 erläutert die Ursachen der spontanen und der piezoelektrischen Polarisierung und die als Folge entstehenden zweidimensionalen Ladungsträgergasen an Heterogrenzflächen. Es schließt sich die Beschreibung der verwendeten experimentellen Methoden (Kapitel 4) und die Vorstellung der untersuchten Proben an (Kapitel 5). In Kapitel 6 werden Herangehensweise und Ergebnisse zur Bestimmung der anisotropen DF von (Al,Ga)N gezeigt. In Kapitel 7 geht es um die Experimente an (GaN/AlGa)N/GaN-Heterostrukturen in Abhängigkeit von der Dicke der Deckschicht sowie die Untersuchungen an AlN/GaN-Supergittern. Abschließend werden die wichtigsten Ergebnisse zusammengefaßt und ein Ausblick auf die weiterführende Forschung am (Al,Ga)N-Materialsystem gegeben.

Kapitel 2

Dielektrische Funktion von Nitridhalbleitern

2.1 Bandstruktur

GaN und AlN sowie ihre Mischkristalle sind direkte Halbleiter. Dies bedeutet, daß sich Leitungsbandminimum und Valenzbandmaximum beide am Γ -Punkt im Zentrum der Brillouinzone befinden. Die Blochwellenfunktion des Leitungsbandes (LB) wird durch die s-Zustände des Ga bzw. Al und insbesondere N bestimmt. Die 2p-Zustände des Stickstoff dominieren hingegen das Valenzband (VB). Ohne Berücksichtigung der Kristallfeldaufspaltung und der Spin-Bahn-Wechselwirkung ist das Valenzband dreifach entartet. In der Nomenklatur der Gruppentheorie spricht man von einem Γ_{15} -Valenzband. Nitridhalbleiter können in der kubischen fcc-Struktur, der hexagonalen Wurtzitstruktur (hcp) und unter extremen äußeren Bedingungen auch in der Steinsalzstruktur kristallisieren. Die Betrachtungen in dieser Arbeit beziehen sich ausschließlich auf hexagonales Material, welches gleichzeitig die thermodynamisch stabilste Form darstellt. Verspannungsfreie Nitridhalbleiter mit Wurtzitstruktur gehören der Raumgruppe $P6_3mc (C_{6v}^4)$ an. Sie besitzen eine erniedrigte Symmetrie, bei der die z -Richtung nicht mehr gleichwertig ist. Dadurch spaltet das dreifach entartete Valenzband in ein zweifach entartetes Band, welches x und y repräsentiert (Γ_6) und ein einfaches z -Band (Γ_1) auf. Man nennt dies auch die Kristallfeldaufspaltung Δ_{cr} . Sie ist linear abhängig vom c/a -Verhältnis der Kristallachsen. Wird zusätzlich auch die Spin-Bahn-Wechselwirkung einbezogen, so wird auch die Entartung des Γ_6 -Bandes aufgehoben und es spaltet in ein Γ_9 - und ein Γ_7 -Band auf. Die Symmetrie des Γ_1 -Bandes ändert sich hierbei ebenfalls zu Γ_7 . Das schrittweise Schema der Aufspaltung der vorher entarteten Valenzbänder ist in Abbildung 2.1 gezeigt. Von

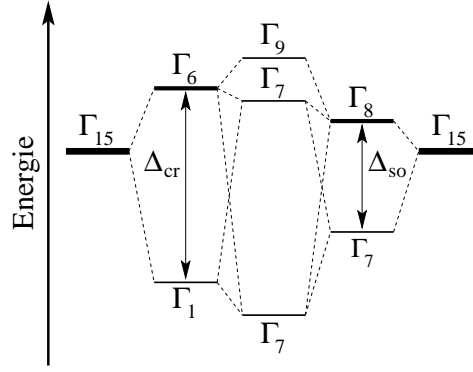


Abbildung 2.1: Aufspaltung der obersten Valenzbänder unter Einfluß von Kristallfeld und Spin-Bahn-Kopplung. Verschiedene Strichstärken symbolisieren Grad der Entartung.

links zur Mitte wird zuerst die Kristallfeldaufspaltung betrachtet und anschließend die Spin-Bahn-Aufspaltung Δ_{so} , von rechts zur Mitte werden diese Effekte in umgekehrter Reihenfolge berücksichtigt, um beide Einflüsse getrennt deutlich zu machen.

Möchte man die relativen Energielagen der Bänder zueinander berechnen, so kann man die $\vec{k}\vec{p}$ -Störungstheorie nach dem Verfahren von Bir und Pikus anwenden [48]. Unter Verwendung der Basisfunktionen aus Referenz [49] erhält man eine (8×8) -Hamiltonmatrix. Diese beinhaltet Leitungs- und Valenzbänder sowie ihre Wechselwirkung untereinander. Aufgrund der großen Bandlücke von GaN und AlN ist die Wechselwirkung mit dem Leitungsband allerdings zu vernachlässigen, was eine separate Betrachtung von LB und VB ermöglicht [50]. Das Leitungsband wird mit der (2×2) -Matrix

$$H_{\text{CC}} = \begin{pmatrix} E_{\text{C}} & 0 \\ 0 & E_{\text{C}} \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

beschrieben, das Valenzband mit der (6×6) -Matrix

$$H_{\text{VV}} = \begin{pmatrix} F & -K^* & -H^* & 0 & 0 & 0 \\ -K & G & H & 0 & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 \\ -H & H^* & \lambda & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F & -K & H \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & -K^* & G & -H^* \\ 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & 0 & H^* & -H & \lambda \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

2.1. BANDSTRUKTUR

Die einzelnen Elemente sind definiert als

$$E_C = E_g + \Delta_1 + \Delta_2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{e||}} + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m_{e\perp}}, \quad (2.3)$$

$$F = \Delta_1 + \Delta_2 + \frac{\hbar^2}{2m_0} [(A_1 + A_3)k_z^2 + (A_2 + A_4)(k_x^2 + k_y^2)], \quad (2.4)$$

$$G = \Delta_1 - \Delta_2 + \frac{\hbar^2}{2m_0} [(A_1 + A_3)k_z^2 + (A_2 + A_4)(k_x^2 + k_y^2)], \quad (2.5)$$

$$K = \frac{\hbar^2}{2m_0} A_5 (k_x + ik_y)^2, \quad (2.6)$$

$$H = \frac{\hbar^2}{2m_0} A_6 k_z (k_x + ik_y), \quad (2.7)$$

$$\lambda = \frac{\hbar^2}{2m_0} [A_1 k_z^2 + A_2 (k_x^2 + k_y^2)]. \quad (2.8)$$

Die effektiven Elektronenmassen parallel und senkrecht zur c -Achse werden mit $m_{e||}$ bzw. $m_{e\perp}$ bezeichnet, E_g ist die Bandlücke des Materials. Die sogenannten A -Parameter (A_j) bestimmen die effektiven Massen der Löcher für die drei VB und entsprechen den Luttinger-Parametern für kubische Kristalle. Im quasikubischen Modell gilt $\Delta_1 = \Delta_{cr}$ und $\Delta_2 = \Delta_3 = \frac{\Delta_{so}}{3}$. Die relativen Energiepositionen der Bänder lassen sich aus den Eigenwerten der Matrizen (2.1) und (2.2) berechnen. Am Γ -Punkt der Brillouinzone für $\vec{k} = 0$ erhält man für das Leitungsband

$$\Gamma_7^C = E_g + \Delta_1 + \Delta_2 \quad (2.9)$$

und für die drei Valenzbänder

$$\Gamma_9^V = \Delta_1 + \Delta_2, \quad (2.10)$$

$$\Gamma_{7+}^V = \frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2} + \sqrt{\left(\frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2}\right)^2 + 2\Delta_3^2}, \quad (2.11)$$

$$\Gamma_{7-}^V = \frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2} - \sqrt{\left(\frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2}\right)^2 + 2\Delta_3^2}. \quad (2.12)$$

Damit beträgt die Aufspaltung zwischen den VB

$$\Gamma_9^V - \Gamma_{7\pm}^V = \frac{\Delta_{cr} + \Delta_{so}}{2} \mp \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta_{cr} + \Delta_{so})^2 - \frac{8}{3} \Delta_{cr} \Delta_{so}}. \quad (2.13)$$

Die Werte für die Spin-Bahn-Energie streuen etwas in der Literatur. Neuere Werte konvergieren aber gegen 18 meV für GaN [51–53] und 19 meV für AlN [54, 55]. Somit sind beide Werte positiv und äußerst nah beieinander. Aus experimentellen Ergebnissen wurden ebenfalls die Werte für Δ_{cr} zu 10 meV für GaN [52] und zu -230 meV für AlN [56] abgeschätzt. Da für GaN sowohl Δ_{so} als auch Δ_{cr} positiv sind, ist die Bänderreihenfolge

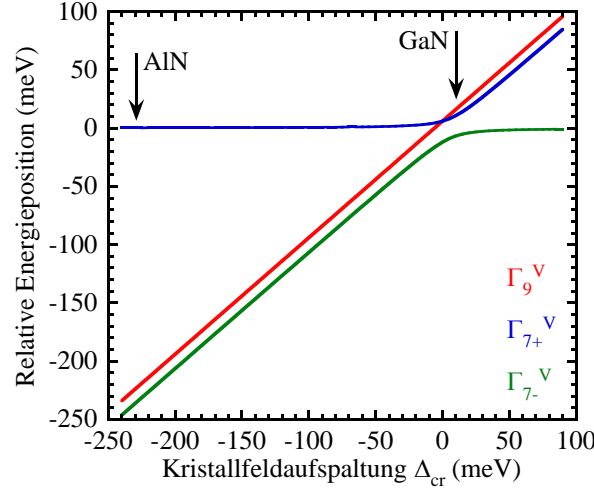


Abbildung 2.2: Relative Energielagen des Γ_9^V -, Γ_{7+}^V - und Γ_{7-}^V -Bandes zueinander in Abhängigkeit von der Kristallfeldaufspaltung für $\Delta_{so} = 18$ meV.

durch $(\Gamma_9^V, \Gamma_{7+}^V, \Gamma_{7-}^V)$ gegeben. Entsprechend ihrer Reihenfolge werden die Valenzbänder beginnend mit dem obersten auch als A-, B- und C-Band bezeichnet. Für $\Delta_{cr} = 0$ wären die beiden obersten Bänder entartet, was dem kubischen Kristall entspricht. Bei AlN ist die Kristallfeldenergie allerdings deutlich negativ. Daraus folgt ein Vertauschen der oberen beiden Bänder im Vergleich zu GaN und die Reihenfolge ist hier $(\Gamma_{7+}^V, \Gamma_9^V, \Gamma_{7-}^V)$. Die relative Energielage der drei Valenzbänder zueinander ist in Abbildung 2.2 für ein festes Δ_{so} von 18 meV in Abhängigkeit von Δ_{cr} gezeigt. Für $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Mischkristalle liegen keine Daten für Δ_{cr} vor. Daher ist zunächst von einer linearen Abhängigkeit vom Al-Gehalt auszugehen. Daraus ergibt sich zwangsläufig, daß das Vertauschen der Bänderreihenfolge bereits bei einem Al-Gehalt von $\sim 4\%$ stattfindet. Von allen drei Valenzbändern $(\Gamma_9^V, \Gamma_{7+}^V, \Gamma_{7-}^V)$ sind optische Übergänge in das Leitungsband möglich. Entsprechend ihrer energetischen Reihenfolge werden sie beginnend mit der kleinsten Übergangsenergie als A-, B- und C-Übergang bezeichnet. Sie besitzen unterschiedliche Oszillatorstärken f in Abhängigkeit der beteiligten Bänder und der Polarisation des anregenden Lichtes. Für senkrecht polarisiertes Licht ($E \perp c$) betragen die relativen Oszillatorstärken

$$f_{A\perp} = 0,5, \quad (2.14)$$

$$f_{B\perp} = \frac{1}{2} \cdot \frac{(\Gamma_{7+}^V)^2}{(\Gamma_{7+}^V)^2 + 2 \left(\frac{\Delta_{so}}{3}\right)^2}, \quad (2.15)$$

$$f_{C\perp} = \frac{1}{2} \cdot \frac{(\Gamma_{7-}^V)^2}{(\Gamma_{7-}^V)^2 + 2 \left(\frac{\Delta_{so}}{3}\right)^2}, \quad (2.16)$$

2.1. BANDSTRUKTUR

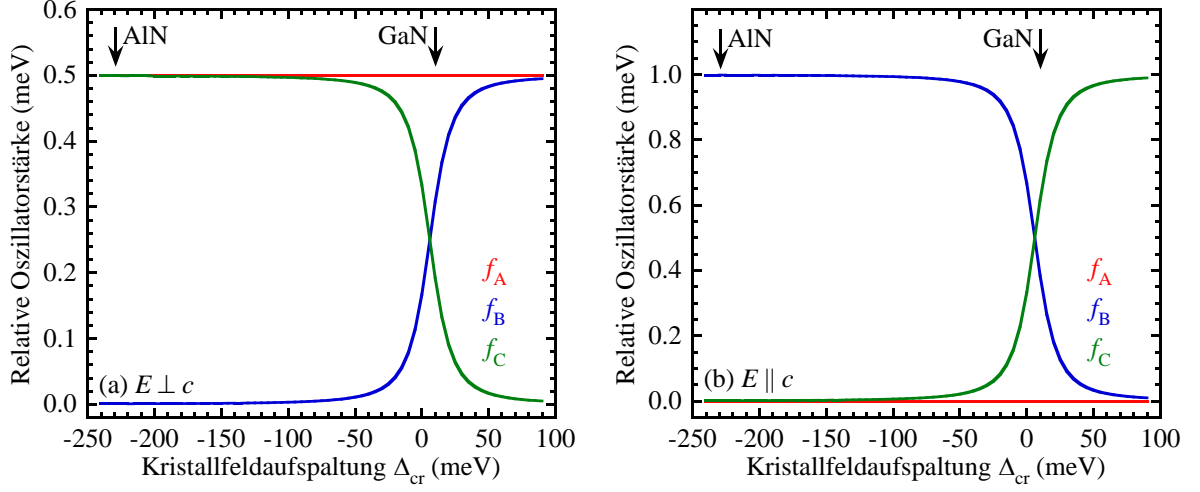


Abbildung 2.3: Relative Oszillatorstärken für den A-, B- und C-Übergang in Abhängigkeit von der Kristallfeldaufspaltung für a) $E \perp c$ und b) $E \parallel c$.

wobei die relativen Energielagen aus Gl. (2.10)–(2.12) einzusetzen sind. Dabei gilt stets die Beziehung $f_A + f_B + f_C = 1$. Ebenso muß die Summe der Oszillatorstärken eines Überganges für die drei Polarisationsrichtungen 1 ergeben. Somit erhält man für parallel polarisiertes Licht

$$f_{A\parallel} = 1 - 2f_{A\perp} = 0 \quad (2.17)$$

$$f_{B\parallel} = 1 - 2f_{B\perp} = 1 - \frac{(\Gamma_{7+}^V)^2}{(\Gamma_{7+}^V)^2 + 2\left(\frac{\Delta_{so}}{3}\right)^2}, \quad (2.18)$$

$$f_{C\parallel} = 1 - 2f_{C\perp} = 1 - \frac{(\Gamma_{7-}^V)^2}{(\Gamma_{7-}^V)^2 + 2\left(\frac{\Delta_{so}}{3}\right)^2}. \quad (2.19)$$

Der Faktor 2 im Subtrahenden rührt von der Tatsache, daß es zwei ordentliche Richtungen gibt im Vergleich zu nur einer außerordentlichen. Die Oszillatorstärken für $E \perp c$ und $E \parallel c$ sind in Abbildung 2.3 für ein festes $\Delta_{so} = 18$ meV in Abhängigkeit von der Kristallfeldaufspaltung dargestellt. Für die ordentliche Polarisationsrichtung ist f_A konstant. Unabhängig von Δ_{cr} ist der A-Übergang stets zu beobachten. Für $E \parallel c$ ist er hingegen verboten und nicht detektierbar. Der B-Übergang ist in ordentlicher Polarisierung stark bei einem positiven Kristallfeld und schwach bei einem negativen Kristallfeld. Für den C-Übergang ist das Verhalten umgekehrt. Für die außerordentliche Polarisationsrichtung ist für diese beiden Übergänge ein gegenteiliges Verhalten zu beobachten.

Aus den Abbildungen 2.2 und 2.3 läßt sich schlußfolgern, daß in GaN der A-Übergang

Tabelle 2.1: Elastische Konstanten von GaN [57] und AlN [58].

	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{13} (GPa)	C_{33} (GPa)	C_{44} (GPa)
GaN	390	145	106	398	105
AlN	396	137	108	373	116

der energetisch niedrigste ist und für $E \perp c$ zugleich auch die höchste Oszillatorstärke besitzt. Der C-Übergang besitzt in dieser Orientierung nur eine geringe Übergangswahrscheinlichkeit. In AlN ist der B-Übergang am niederenergetischsten. Bei ordentlicher Polarisierung ist die Absorptionskante aufgrund seiner geringen Oszillatorstärke dennoch durch den A-Übergang dominiert. Ebenso tritt hier der C-Übergang in Erscheinung. Bei $E \parallel c$ ist lediglich der B-Übergang deutlich vertreten.

Die Betrachtungen gelten streng genommen nur für unverspanntes Material. Die Gitterfehlانpassung durch das Wachstum auf Fremdsubstraten sowie die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten führen jedoch zu einer biaxialen Verspannung in der Wachstumsebene.

Solange die Verzerrung des Kristalls klein ist, gilt zwischen Verzerrung ϵ und mechanischer Spannung σ der lineare Zusammenhang

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ijkl} \epsilon_{kl}, \quad (2.20)$$

was einer verallgemeinerten Form des Hookeschen Gesetzes entspricht. Die Komponenten ϵ_{xx} , ϵ_{yy} und ϵ_{zz} beschreiben senkrechte Verzerrungen, während die Nichtdiagonalelemente des Tensors Scherspannungen charakterisieren. Die elastischen Konstanten C_{ijkl} stellen den Proportionalitätsfaktor in der Gleichung dar und bilden einen Tensor vierter Stufe. Dieser läßt sich unter der Voraussetzung gewisser Symmetrieeigenschaften des Spannungstensors und des Verzerrungstensors auf einen Tensor zweiter Stufe reduzieren. Für Kristalle mit Wurtzitstruktur gelangt man so für Gleichung (2.20) zu der Vektor-Matrix-Schreibweise

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{xz} \\ 2\epsilon_{xy} \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

Die elastischen Konstanten für GaN [57] und AlN [58] sind in Tabelle 2.1 aufgeführt.

2.1. BANDSTRUKTUR

Durch die Verspannung ändert sich die Kristallsymmetrie von C_{6v} zu C_{2v} . Es verschieben sich die Übergangsenergien und es treten Änderungen der Oszillatorstärken auf. Der Beitrag der Verspannung kann zu den Matrixelementen der Matrizen (2.1) und (2.2) dazuaddiert werden. Dadurch erhalten die Gleichungen (2.3)–(2.8) die Form

$$E_C = E_g + \Delta_1 + \Delta_2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{e||}} + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m_{e\perp}} + \alpha_{cz}\epsilon_{zz} + \alpha_{ct}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}), \quad (2.22)$$

$$F = \Delta_1 + \Delta_2 + \frac{\hbar^2}{2m_0} [(A_1 + A_3)k_z^2 + (A_2 + A_4)(k_x^2 + k_y^2)] + (D_1 + D_3)\epsilon_{zz} + (D_2 + D_4)(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}), \quad (2.23)$$

$$G = \Delta_1 - \Delta_2 + \frac{\hbar^2}{2m_0} [(A_1 + A_3)k_z^2 + (A_2 + A_4)(k_x^2 + k_y^2)] + (D_1 + D_3)\epsilon_{zz} + (D_2 + D_4)(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}), \quad (2.24)$$

$$K = \frac{\hbar^2}{2m_0} A_5 (k_x + ik_y)^2 + D_5(\epsilon_{xx} + 2i\epsilon_{xy} - \epsilon_{yy}), \quad (2.25)$$

$$H = \frac{\hbar^2}{2m_0} A_6 k_z (k_x + ik_y) + D_6(\epsilon_{zx} + i\epsilon_{yz}), \quad (2.26)$$

$$\lambda = \frac{\hbar^2}{2m_0} [A_1 k_z^2 + A_2 (k_x^2 + k_y^2)] + D_1 \epsilon_{zz} + D_2 (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}). \quad (2.27)$$

Die Parameter α_i bzw. D_i beschreiben hierbei die Deformationspotentiale für das Leitungs- und das Valenzband. Das Bandkantenmodell kann bei $\vec{k} = 0$ durch Blockdiagonalisierung auf die (3×3) -Matrix

$$\begin{pmatrix} \Delta_1 + \delta_1 + \delta_2 - \delta_3 & -\Delta_2 & \Delta_3 \\ -\Delta_2 & \Delta_1 + \delta_1 + \delta_2 + \delta_3 & \Delta_3 \\ \Delta_3 & \Delta_3 & \delta_1 \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

reduziert werden, deren Basis die drei Γ_5 -Funktionen der C_{2v} -Symmetriegruppe sind [59]. Die verwendeten Abkürzungen ergeben sich dabei aus

$$\delta_1 = (D_1 + \alpha_{cz})\epsilon_{zz} + (D_2 + \alpha_{ct})(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}), \quad (2.29)$$

$$\delta_2 = D_3\epsilon_{zz} + D_4(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}), \quad (2.30)$$

$$\delta_3 = D_5(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}). \quad (2.31)$$

Die Energieverschiebung der drei Übergänge errechnet sich aus den Eigenwerten von Matrix (2.28). Tabelle 2.2 enthält die hierfür benötigten Parameter [60–62]. Für c -achsenorientiertes Material mit isotroper Verspannung in der Wachstumsebene ist $\delta_3 = 0$. Die Verzerrungen sind durch die verspannten Gitterkonstanten a und c sowie ihre unver-

Tabelle 2.2: Valenz- und Leitungsbandparameter für GaN [60] und AlN [61, 62].

	α_{cz}	α_{ct}	D_1	D_2	D_3	D_4	D_5	D_6
	(eV)	(eV)	(eV)	(eV)	(eV)	(eV)	(eV)	(eV)
GaN	-44,5	-44,5	-41,4	-33,3	8,2	-4,1	-4,7	-5,5
AlN	-3,4	-11,8	-17,1	7,9	8,8	-3,9	-3,4	-3,4

spannten Werte a_0 und c_0 bestimmt:

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a - a_0}{a_0}, \quad (2.32)$$

$$\epsilon_{zz} = \frac{c - c_0}{c_0} = -\frac{C_{13}}{C_{33}}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) = -2\frac{C_{13}}{C_{33}}\frac{a - a_0}{a_0}. \quad (2.33)$$

Für diesen Spezialfall ergeben sich die Energieeigenwerte für die Bänder aus

$$E_C(\epsilon) = E_g + \Delta_1 + \Delta_2 + \alpha_{cz}\epsilon_{zz} + \alpha_{ct}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}), \quad (2.34)$$

$$E_V^A(\epsilon) = \Delta_1 + \Delta_2 + (D_1 + D_3)\epsilon_{zz} + (D_2 + D_4)(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}), \quad (2.35)$$

$$E_V^{B,C}(\epsilon) = \frac{\Delta_1 - \Delta_2 + (2D_1 + D_3)\epsilon_{zz} + (2D_2 + D_4)(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy})}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\Delta_1 - \Delta_2 + D_3\epsilon_{zz} + D_4(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy})}{2}\right)^2 + 2\Delta_3^2}. \quad (2.36)$$

In Abbildung 2.4 sind die drei Übergangsenergien in Abhängigkeit von $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$ dargestellt. Vergleicht man das Diagramm mit Abbildung 2.2, so läßt sich feststellen, daß eine

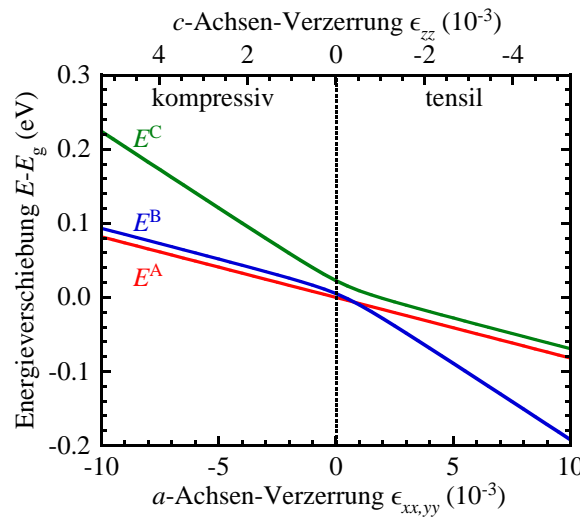


Abbildung 2.4: Band-zu-Band-Übergangsenergien für c -achsenorientiertes GaN in Abhängigkeit von der isotropen Verspannung in der Wachstumsebene.

2.1. BANDSTRUKTUR

kompressive (tensile) Verspannung in der Wachstumsebene in Bezug auf die Aufspaltung der Übergänge eine ähnliche Wirkung hat wie eine Erhöhung (Erniedrigung) von Δ_{cr} . Bei einer tensilen Verspannung von $\epsilon_{xx} \sim 10^{-3}$ kreuzen der A- und der B-Übergang. Bei Kompression ist der A-Übergang der energetisch niedrigste, bei stärkerer tensiler Verspannung der B-Übergang. Für AlN ist aufgrund der stark negativen Kristallfeldaufspaltung ein derartiges Kreuzen nur bei extremen kompressiven Spannungen möglich und daher kaum zu beobachten. Der B-Übergang ist hier stets der niedrigste.

Zu jedem Band-Band-Übergang gibt es auch energetisch dicht unterhalb liegende diskrete exzitonische Übergänge (A-, B- und C-Exziton). Durch Lösen der Schrödingergleichung für ein aneinander gebundenes Elektron-Loch-Paar erhält man analog zum Problem des Wasserstoffatoms die diskreten Energiewerte

$$E_n = E_g + \frac{\hbar^2 K^2}{2M^*} - \frac{e^4 \mu^*}{2(4\pi\hbar\epsilon_0\epsilon_r)^2} \cdot \frac{1}{n^2}. \quad (2.37)$$

Hierbei stellt der zweite Term die kinetische Energie des Exzitons mit der Gesamtmasse $M^* = m_e^* + m_h^*$ und dem Gesamtimpuls K dar. Der dritte Term beschreibt die Coulombwechselwirkung mit der reduzierten effektiven Masse μ^* , welche durch

$$\frac{1}{\mu^*} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \quad (2.38)$$

gegeben ist, mit ϵ_0 und ϵ_r als Dielektrizitätskonstante des Vakuums und relative statische Dielektrizitätszahl des Materials sowie mit $n = 1, 2, 3, \dots$. Die Bindungsenergie eines Exzitons im Grundzustand ($n = 1$) ergibt sich nach Gl. (2.37) aus

$$E_b = \frac{e^4 \mu^*}{2(4\pi\hbar\epsilon_0\epsilon_r)^2} \approx 13,6 \text{ eV} \cdot \frac{\mu^*}{\epsilon_r^2}. \quad (2.39)$$

Für GaN beträgt sie 25 meV [63], für AlN liegt sie bei ca. 50 meV. Neben den freien Exzitonen (FX) gibt es auch an Störstellen gebundene Exzitonen. Aufgrund ihrer nochmals deutlich geringeren Bindungsenergie (6-7 meV) [64] treten sie nur bei sehr tiefen Temperaturen ($T < 60 \text{ K}$) auf. Das Einbeziehen der Elektron-Loch-Wechselwirkung, was aufgrund der großen effektiven Rydbergenergien der Nitridhalbleiter unausweichlich ist, führt zu kleineren Abweichungen der Oszillatorstärken gegenüber den Band-zu-Band-Übergängen, ändert aber nichts am generellen Verhalten [65].

Bei $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Mischkristallen liegen sämtliche Übergangsenergien entsprechend dem Al-Anteil zwischen denen der binären Verbindungen. Die Verschiebung ist allerdings nichtlinear, so daß ein Durchbiegungsparameter b_E (engl.: *bowing*) eingeführt wird. Es gilt dann das Gesetz

$$E_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = xE_{\text{AlN}} + (1-x)E_{\text{GaN}} - b_E x(1-x). \quad (2.40)$$

2.2 Dielektrische Funktion

Die optischen Eigenschaften eines Materials lassen sich mit Hilfe der dielektrischen Funktion (DF) beschreiben. Im allgemeinen ist die DF eine komplexe Größe

$$\bar{\varepsilon} = \varepsilon_1(\hbar\omega) + i\varepsilon_2(\hbar\omega), \quad (2.41)$$

deren Real- und Imaginärteil frequenz- bzw. wellenlängenabhängig sind. Bedingt durch die hexagonale Kristallstruktur ist die c -Achse in Nitridhalbleitern optisch ausgezeichnet. Die DF ist somit nicht isotrop, sondern die optischen Eigenschaften hängen davon ab, wie hoch der jeweilige Anteil des elektrischen Feldes senkrecht und parallel zur optischen (c -)Achse ist. Die DF erhält damit die Form

$$\bar{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \bar{\varepsilon}_x & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\varepsilon}_y & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\varepsilon}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\varepsilon}_o & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\varepsilon}_o & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\varepsilon}_e \end{pmatrix}. \quad (2.42)$$

ε_o bezeichnet hierbei die ordentliche und ε_e die außerordentliche DF. Real- und Imaginärteil sind jeweils über die Kramers-Kronig-Relation

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \wp \int_0^\infty \frac{\omega' \cdot \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (2.43)$$

miteinander verknüpft. \wp symbolisiert den Cauchyschen Hauptwert des Integrals. Der Zusammenhang zwischen DF und komplexem Brechungsindex ist durch

$$\bar{N}(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega) = \sqrt{\bar{\varepsilon}(\omega)} \quad (2.44)$$

mit n als Brechungsindex und κ als Extinktionskoeffizient gegeben. Eine weitere wichtige Größe ist der Absorptionskoeffizient

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{n(\omega)c_0} \varepsilon_2(\omega), \quad (2.45)$$

wobei c_0 die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ist. Der Absorptionskoeffizient dient z.B. der Bestimmung von Lichteindringtiefen. Zu beachten ist, daß α nicht nur proportional zu ε_2 ist, sondern auch vom spektralen Verlauf von n bestimmt wird, was in vielen Arbeiten vernachlässigt wird.

Die Berechnung der DF auf der Basis der Einteilchenbandstruktur mit den wellenvektorrabhängigen Leitungs- $E_C(\vec{k})$ und Valenzbandenergien $E_V(\vec{k})$ erfolgt durch die Anwendung von Fermis goldener Regel und führt zu

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\pi \hbar e^2}{\varepsilon_0 \omega m_0} \frac{1}{8\pi^3} \sum_{\mathbf{v}} \sum_{\mathbf{c}} \int_{\text{BZ}} f_{\text{CV}}(\vec{k}) \delta(E_C(\vec{k}) - E_V(\vec{k}) - \hbar\omega) d^3k \quad (2.46)$$

2.2. DIELEKTRISCHE FUNKTION

mit der freien Elektronenmasse m_0 und der Elementarladung e . Die optische Anisotropie ist eine Folge der orientierungsabhängigen Oszillatorstärke $f_{\text{CV}}(\vec{k})$. Es wird über die gesamte Brillouinzone integriert. An Stellen, wo Leitungs- und Valenzband den gleichen Gradienten aufweisen ($\nabla_{\vec{k}}(E_C(\vec{k}) - E_V(\vec{k})) = 0$), gibt es Besonderheiten in der Linienform von $\varepsilon_2(\omega)$, welche kritische Punkte (CP) der Bandstruktur bzw. van-Hove-Singularitäten genannt werden. Für einen dreidimensionalen M_0 -kritischen Punkt läßt sich unter der Annahme einer parabolischen Bandstruktur die Integration in Gleichung (2.46) durch geschicktes Substituieren leicht ausführen. Für einen anisotropen Halbleiter erhält man

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{e^2 \sqrt{2m_x^* m_y^* m_z^*} f_{\text{CV}}}{2\pi \varepsilon_0 \hbar} \frac{1}{\hbar \omega} \sqrt{\hbar \omega - E_g} \cdot \mathcal{H}(\hbar \omega - E_g) \quad (2.47)$$

mit \mathcal{H} als Heavyside-Stufenfunktion. In diesem Fall ist ε_2 unterhalb des kritischen Punktes (Bandlücke) 0, während oberhalb eine wurzelförmige Abhängigkeit von der Photonenenergie festzustellen ist.

Die bisherige Betrachtung basiert auf der Einteilchenbandstruktur. Durch das Auftreten von Exzitonen ist beim Lösen der Schrödingergleichung jedoch die Coulombwechselwirkung zwischen Elektron und Loch zu berücksichtigen. Unterhalb der Bandlücke befinden sich gebundene Zustände (Gleichung (2.37)). Ihr Beitrag zu ε_2 ist durch

$$\varepsilon_2^{\text{Exz.}}(\hbar \omega) = 2\pi \frac{e^2 \sqrt{2m_x^* m_y^* m_z^*} f_{\text{CV}}}{2\pi \varepsilon_0 \hbar} \sqrt{E_b} \frac{1}{\hbar \omega} \sqrt{\hbar \omega - E_g} \sum_n \frac{2E_b}{n^3} \delta(\hbar \omega - E_g + E_n) \quad (2.48)$$

gegeben. Oberhalb der Bandlücke existieren Kontinuumszustände. Hier beträgt der Imaginärteil der DF

$$\varepsilon_2^{\text{Exz.}}(\hbar \omega) = 2\pi \frac{e^2 \sqrt{2m_x^* m_y^* m_z^*} f_{\text{CV}}}{2\pi \varepsilon_0 \hbar} \sqrt{E_b} \frac{1}{\hbar \omega} \frac{\mathcal{H}(\hbar \omega - E_g)}{1 - \exp\left(-2\pi \sqrt{\frac{E_b}{\hbar \omega - E_g}}\right)}. \quad (2.49)$$

Es läßt sich also feststellen, daß der Beitrag der Exzitonen sowohl unter- als auch oberhalb der Bandkante zu einer Erhöhung von ε_2 führt.

Jeder CP, der in $\varepsilon_2(\omega)$ zu beobachten ist, beeinflusst über Gl. (2.43) den gesamten Verlauf von $\varepsilon_1(\omega)$, weshalb für die Modellierung die Kenntnis der DF über einen ausgedehnten Spektralbereich erforderlich ist.

Kapitel 3

Polarisationseigenschaften von Nitridhalbleitern

3.1 Spontane Polarisation

Um sich die Kristallstruktur eines Nitridhalbleiters vorzustellen, geht man von einer Atomlage aus, in der jedes Atom von sechs Nachbarn umgeben ist. Dies ist die Grundfläche einer hexagonal dichtesten Kugelpackung. Eine ebensolche zweite Schicht wird nun so auf die erste gepackt, daß sich jedes ihrer Atome in der Lücke zwischen drei Atomen der darunterliegenden Schicht befindet. Im fcc-Kristall würden die Atome der dritten Lage die Lücken der ersten Schicht ausfüllen, die von der zweiten unbesetzt geblieben sind (A-B-C-

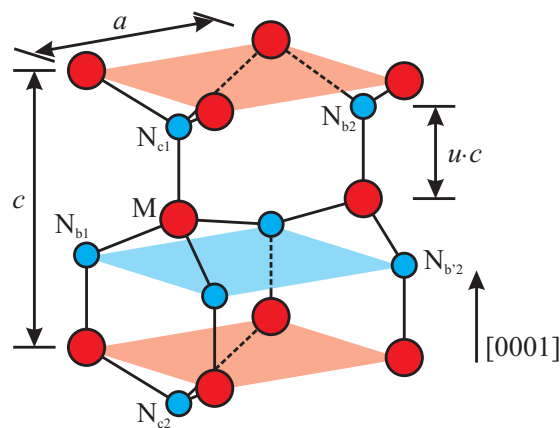


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Kristallstruktur eines hexagonalen Nitridhalbleiters unter besonderer Berücksichtigung der nächsten und übernächsten Nachbarn des zentralen Metallatoms.

3.1. SPONTANE POLARISATION

A-B-C-Stapelfolge). Bei der in dieser Arbeit betrachteten Wurtzitstruktur ist die dritte Lage wieder ebenso angeordnet wie die erste (A-B-A-B-Stapelfolge). Eine Darstellung der Kristallstruktur hexagonaler Nitridhalbleiter findet sich in Abbildung 3.1. Es läßt sich ein gitterinterner Parameter u einführen, welcher durch das Verhältnis einer Metall-Stickstoff-Bindungslänge, orientiert entlang der $[0001]$ -Richtung des Wurtzitgitters, und der Gitterkonstanten c definiert ist. In einem idealen Kristall ist sein Wert $u = \frac{3}{8} = 0,375$ und das Verhältnis der Gitterkonstanten beträgt $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1,633$. Ausgehend vom zentralen Metallatom (M) ist leicht erkennbar, daß jedes Atom Tetraederbindungen zu den vier nächsten Nachbarn (Index 1) ausbildet. Drei der nächsten Nachbarn (N_{b1}) befinden sich in der Basalebene, die Bindung zum vierten nächsten Nachbarn (N_{c1}) verläuft entlang der c -Achse. Die Bindungslängen sind gegeben durch

$$M - N_{c1} = uc, \quad (3.1)$$

$$M - N_{b1} = \sqrt{\frac{1}{3}a^2 + \left(\frac{1}{2} - u\right)^2 c^2}. \quad (3.2)$$

Desweiteren gibt es zehn übernächste Nachbarn (Index 2). Sie lassen sich in drei Gruppen einteilen - einen Nachbar entlang der c -Achse (N_{c2}), sechs in der höherliegenden Basalebene (N_{b2}) und drei in der darunterliegenden Basalebene ($N_{b'2}$). Hier betragen die Bindungslängen

$$M - N_{c2} = (1 - u)c, \quad (3.3)$$

$$M - N_{b2} = \sqrt{a^2 + (uc)^2}, \quad (3.4)$$

$$M - N_{b'2} = \sqrt{\frac{4}{3}a^2 + \left(\frac{1}{2} - u\right)^2 c^2}. \quad (3.5)$$

Ga und Al weisen im Gegensatz zu Stickstoff deutlich unterschiedliche Elektronegativitäten auf (Ga: 1,6; Al: 1,5; N: 3,0). Daher besitzen die Bindungen in Gruppe-III-Nitriden ein ausgeprägtes Dipolmoment. In einem idealen Kristall sind alle Bindungen zu den nächsten Nachbarn gleich lang (Bindungslänge: $\frac{3}{8}c$), so daß sich die einzelnen Dipolmomente gegenseitig aufheben. Bei den übernächsten Nachbarn ist dies nicht der Fall. Die Bindung $M - N_{c2}$ hat eine Länge von $\frac{5}{8}c$ im Vergleich zu $\frac{\sqrt{33}}{8}c$ für $M - N_{b2}$ und $M - N_{b'2}$ und ist somit ca. 13% kürzer. Summiert man hier über die Dipolmomente pro Volumeneinheit auf, erhält man einen makroskopischen Polarisationsvektor vom N-Atom in Richtung des jeweiligen Metall-Atoms in $[000\bar{1}]$ -Richtung. Man spricht hierbei von einer spontanen Polarisation P^{SP} , da diese auch ohne von außen eingeprägte elektrische Felder oder sonstige etwaige Störungen vorhanden ist. Materialien mit dieser Eigenschaft nennt man pyroelektrisch. Der Polarisationsvektor zeigt stets entlang der c -Achse, wobei

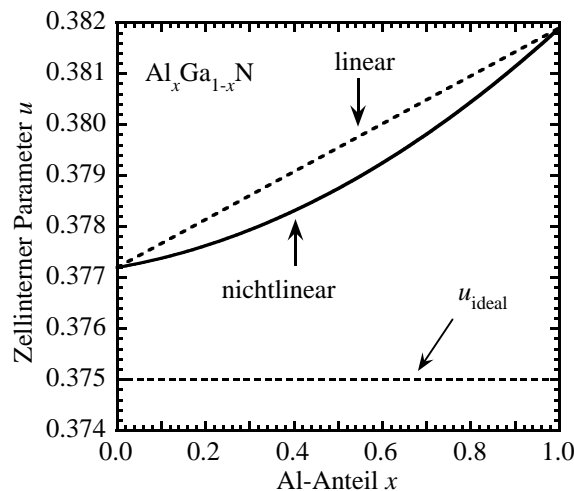


Abbildung 3.2: Zellinterner Parameter für AlGa_N-Mischkristalle in Abhängigkeit vom Al-Gehalt. Quadratische Abhängigkeit (durchgezogen) im Vergleich zu linearer Interpolation und Idealkristall (gestrichelt).

der Richtungssinn fest durch die Polarität des Kristalls vorgegeben ist und nicht wie bei Ferroelektrika durch elektrische Felder umgekehrt werden kann.

Reale GaN- und AlN-Kristalle haben keine ideale Gitterstruktur. Wie theoretische [66,67] und experimentelle Arbeiten [68–72] zeigen, weichen u und das c/a -Verhältnis von den Idealwerten ab. Man findet $\frac{c}{a} = 1,634$ und $u = 0,3772$ für GaN bzw. $\frac{c}{a} = 1,606$ und $u = 0,3819$ für AlN [73]. Diese Abweichungen von der idealen Kristallstruktur machen sich durch veränderte Bindungswinkel und -längen bemerkbar. Man erwartet für GaN Bindungslängen zwischen nächsten Nachbarn von $1,959 \text{ \AA}$ und für AlN $1,904 \text{ \AA}$. Tatsächlich stellt man jedoch fest, daß die $M - N_{c1}$ -Bindungen geringfügig länger sind als die drei $M - N_{b1}$ -Bindungen (in GaN $1,971 \text{ \AA}$ im Gegensatz zu $1,955 \text{ \AA}$, in AlN $1,907 \text{ \AA}$ gegenüber $1,890 \text{ \AA}$). Die $M - N_{c2}$ -Bindungen werden in Relation zu den anderen Bindungen übernächster Nachbarn noch kürzer. Natürlich müssen auch die Beiträge drittnächster, viertnächster usw. Nachbarn berücksichtigt werden. Bernardini und Fiorentini liefern hierfür theoretische Ansätze [66]. Im Ergebnis zeigt sich, daß P^{SP} linear vom zellinternen Parameter u abhängt. Für GaN ergibt sich eine spontane Polarisierung von $P_{\text{GaN}}^{\text{SP}} = -0,034 \frac{\text{C}}{\text{m}^2}$ und für AlN $P_{\text{AlN}}^{\text{SP}} = -0,090 \frac{\text{C}}{\text{m}^2}$, womit der Wert in AlN deutlich höher ist als in GaN.

Bei AlGa_N-Mischkristallen haben Röntgenuntersuchungen gezeigt, daß die Gitterkonstanten dem Vegardschen Gesetz genügen [72]. Das heißt, es kann für eine beliebige

3.1. SPONTANE POLARISATION

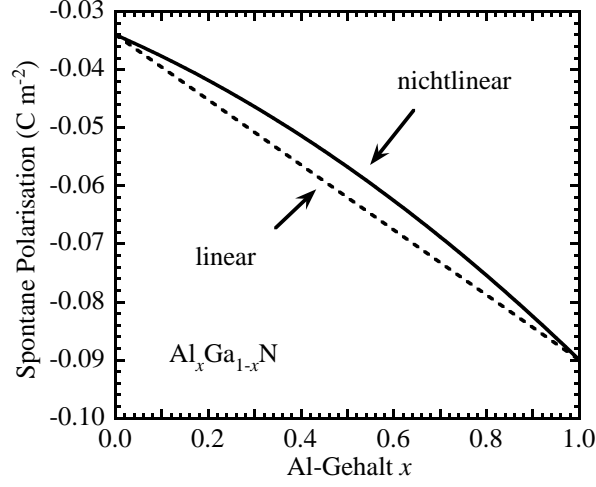


Abbildung 3.3: Spontane Polarisation für AlGa_N-Mischkristalle in Abhängigkeit vom Al-Gehalt. Quadratische Abhängigkeit im Vergleich zu linearer Interpolation.

Zusammensetzung linear interpoliert werden:

$$a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}(x) = xa_{\text{AlN}}(x) + (1-x)a_{\text{GaN}}, \quad (3.6)$$

$$c_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}(x) = xc_{\text{AlN}}(x) + (1-x)c_{\text{GaN}}. \quad (3.7)$$

Für das $\frac{e}{a}$ -Verhältnis und u gilt dieser lineare Zusammenhang nicht mehr [74]. Vielmehr wird die Abhängigkeit vom Al-Gehalt mit einer quadratischen Funktion approximiert, indem ein Durchbiegungsparameter b_u eingeführt wird. Damit kann $u(x)$ wie in Abbildung 3.2 gezeigt durch

$$\begin{aligned} u_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}(x) &= xu_{\text{AlN}} + (1-x)u_{\text{GaN}} - b_u x(1-x) \\ &= 0,3819x + 0,3772(1-x) - 0,0032x(1-x) \end{aligned} \quad (3.8)$$

beschrieben werden [73]. Zum Vergleich wurde mit gestrichelten Linien die lineare Interpolation sowie u für den Idealkristall abgebildet. Die nichtlineare Abhängigkeit von u erklärt sich durch die unterschiedliche Reaktion der binären Mischkristallkomponenten auf hydrostatischen Druck, Ladungstransfer zwischen den Kationen aufgrund ihrer unterschiedlichen Elektronegativität, interne Verspannungseffekte durch variierende Kationen-Anionen-Bindungslängen sowie Fehlordnungseffekte durch die zufällige Verteilung der verschiedenen Metallatome auf den Kationenplätzen im Gitter.

Aufgrund der nichtlinearen Abhängigkeit des zellinternen Parameters vom x -Anteil hängt auch P^{SP} nichtlinear von der Mischkristallzusammensetzung ab. Für AlGa_N

gilt [73]

$$P_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}^{\text{SP}} = (-0,090x - 0,034(1-x) + 0,021x(1-x)) \frac{\text{C}}{\text{m}^2}. \quad (3.9)$$

Terme höherer Ordnung sind zu vernachlässigen. Abbildung 3.3 zeigt den Verlauf von $P^{\text{SP}}(x)$. Der Fehler bei linearer Interpolation beträgt bei keiner Zusammensetzung mehr als 10%.

3.2 Piezoelektrische Polarisation

Dünne Schichten in Halbleiterstrukturen wachsen gewöhnlich pseudomorph auf. Dies bedeutet, daß sie in der Wachstumsebene die Gitterkonstante der darunterliegenden dicken Schicht annehmen. Die Gitterfehlanpassung führt zu einer biaxialen mechanischen Verspannung des Materials in der Wachstumsebene und bedeutet eine Deformation der Elementarzelle. Daraus folgt eine zusätzliche verspannungsinduzierte piezoelektrische Polarisation P^{PZ} . Die Verknüpfung mit der mechanischen Spannung erfolgt über den Tensor der piezoelektrischen Module d_{ijk} :

$$P_i^{\text{PZ}} = d_{ijk} \sigma_{jk}. \quad (3.10)$$

Unter Ausnutzung der Symmetrie des Tensors läßt sich die Gleichung in die Vektor-Matrix-Schreibweise

$$\begin{pmatrix} P_x^{\text{PZ}} \\ P_y^{\text{PZ}} \\ P_z^{\text{PZ}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

überführen, wobei für die Wurtzitstruktur die meisten Komponenten den Wert Null annehmen. Die piezoelektrischen Module sind Tabelle 3.1 zu entnehmen [75]. Wenn man

Tabelle 3.1: Piezoelektrische Module von GaN und AlN [75].

	d_{31} (pm/V)	d_{33} (pm/V)	d_{15} (pm/V)
GaN	-1,6	3,1	3,1
AlN	-2,1	5,4	3,6

3.2. PIEZOELEKTRISCHE POLARISATION

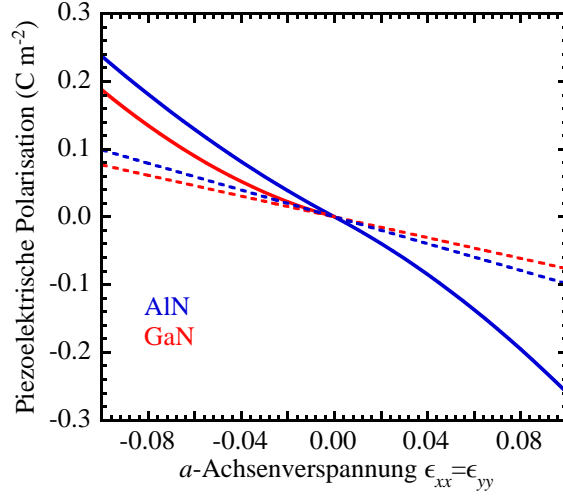


Abbildung 3.4: Piezoelektrische Polarisation für GaN (rot) und AlN (blau) nach Gleichungen (3.13) und (3.14) (durchgezogen). Lineare Abhängigkeit nach Gleichung (3.12) zum Vergleich (gestrichelt).

davon ausgeht, daß keine Scherspannung vorliegt ($\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0$), so reduziert sich die piezoelektrische Polarisation auf die z -Komponente

$$P^{\text{PZ}} = P_z^{\text{PZ}} = d_{31}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + d_{33}\sigma_{zz} \quad (3.12)$$

In dieser Betrachtung hängt P_{PZ} linear von der Verspannung ab, basierend auf der Gültigkeit des Hookeschen Gesetzes und der Annahme, daß die elastischen und piezoelektrischen Konstanten unabhängig von ϵ bzw. σ sind. Für sehr große Spannungen ist dies nicht mehr gegeben. Berechnungen mittels Dichtefunktionaltheorie resultieren für isotrope Verspannungen in der Wachstumsebene in folgenden nichtlinearen Abhängigkeiten für AlN und GaN [73]:

$$P_{\text{AlN}}^{\text{PZ}} = (-1,808\epsilon_{xx} + 5,624\epsilon_{xx}^2) \frac{\text{C}}{\text{m}^2} \quad (\epsilon_{xx} < 0), \quad (3.13a)$$

$$P_{\text{AlN}}^{\text{PZ}} = (-1,808\epsilon_{xx} - 7,888\epsilon_{xx}^2) \frac{\text{C}}{\text{m}^2} \quad (\epsilon_{xx} > 0), \quad (3.13b)$$

$$P_{\text{GaN}}^{\text{PZ}} = (-0,918\epsilon_{xx} + 9,541\epsilon_{xx}^2) \frac{\text{C}}{\text{m}^2} \quad (\epsilon_{xx} < 0). \quad (3.14)$$

Obwohl die Autoren keine expliziten Aussagen über den Gültigkeitsbereich von Gleichung (3.14) treffen, gilt diese nur für $\epsilon_{xx} < 0$. Abbildung 3.4 zeigt die gefundenen Abhängigkeiten für GaN und AlN. Insbesondere für GaN wird die Nichtlinearität in der Abbildung klar erkennbar. Auch wird offensichtlich, daß Gleichung (3.12) nur in begrenztem Maße

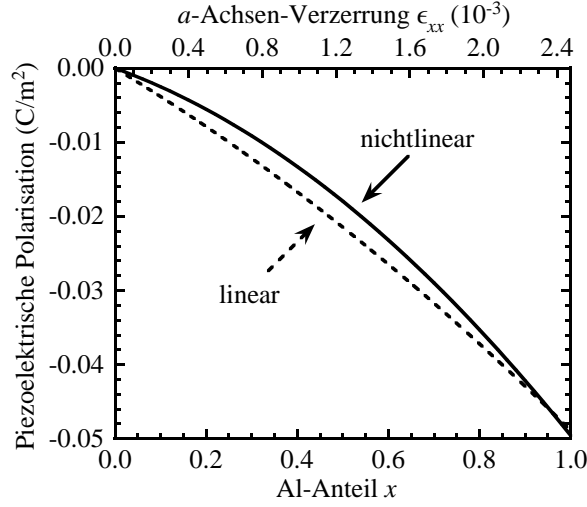


Abbildung 3.5: Piezoelektrische Polarisation von pseudomorph aufgewachsenem $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ auf unverspanntem GaN mit nichtlinearer Abhängigkeit von ϵ_{xx} (durchgezogen) sowie linearer Näherung nach Gleichung (3.12).

angewendet werden kann und für große Spannungen den Wert von P^{PZ} signifikant unterschätzt. Abschließend läßt sich feststellen, daß bei tensil verspannten Nitridhalbleitern \vec{P}^{SP} und \vec{P}^{PZ} in die gleiche Richtung wirken, während sie bei Kompression antiparallel ausgerichtet sind.

Für AlGa_N-Mischkristalle läßt sich P^{PZ} ganz einfach über

$$P_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}^{\text{PZ}} = xP_{\text{AlN}}^{\text{PZ}}(\epsilon(x)) + (1-x)P_{\text{GaN}}^{\text{PZ}}(\epsilon(x)) \quad (3.15)$$

berechnen, indem man zunächst bei gegebener Verzerrung die piezoelektrische Polarisation der binären Verbindungen bestimmt und anschließend linear mittelt. Von besonderer technologischer Relevanz ist die Abscheidung dünner pseudomorpher Schichten auf dicken Puffern, welche als nahezu unverspannt angesehen werden können. Ausgehend von einer Gitterkonstante von $a_{0,\text{GaN}} = 3,189 \text{ \AA}$ für GaN [68, 71, 72] und $a_{0,\text{AlN}} = 3,112 \text{ \AA}$ für AlN [70, 72] ergibt sich die piezoelektrische Polarisation einer dünnen $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Schicht auf GaN wie in Abbildung 3.5 dargestellt. Die durchgezogene Linie wurde nach Gleichung (3.15) berechnet, während bei der Vergleichskurve (gestrichelt) linear zwischen den Materialkonstanten gemittelt wurde, um anschließend P^{PZ} aus Gleichung (3.12) zu gewinnen. Der Unterschied ist mit $3,5 \times 10^{-3} \frac{\text{C}}{\text{m}^2}$ am größten für einen Al-Gehalt von 48%.

3.3 Zweidimensionale Elektronen- und Löchergase

Wie bereits gezeigt wurde, hängt die Gesamtpolarisation P in Nitridhalbleitern, welche sich aus spontaner und piezoelektrischer Polarisation zusammensetzt, entscheidend von der Mischkristallzusammensetzung und vom Verspannungszustand des Materials ab. Daher ist in Heterostrukturen sowohl an Grenzflächen (GF) als auch an der Oberfläche (OF) von einem Polarisationsgradienten auszugehen. Mit diesem Gradienten ist eine Polarisationsladungsdichte

$$\rho_P = -\nabla P \quad (3.16)$$

verknüpft. An einer ideal scharfen Grenzfläche findet die Polarisationsänderung innerhalb einer Doppellage im Kristall statt, wodurch die Verteilung der Polarisationsladungen einen zweidimensionalen Charakter erhält. Die resultierende Flächenladungsdichte ergibt sich aus der Differenz der Gesamtpolarisationen der Medien 1 und 2 an der GF:

$$\sigma_P = -\Delta P = -(P_2 - P_1) = -[(P_2^{\text{SP}} + P_2^{\text{PZ}}) - (P_1^{\text{SP}} + P_1^{\text{PZ}})]. \quad (3.17)$$

Für den Spezialfall der Oberfläche ist die Polarisation des oberen Mediums P_2 gleich Null. Im AlGa_N-System stellt der Fall einer pseudomorphen AlN-Schicht auf unverspanntem GaN eine obere Abschätzung für σ_P dar. Für die AlN-OF erhält man $\sigma_P^{\text{OF}} = -8,71 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ und für die AlN/GaN-GF $\sigma_P^{\text{GF}} = +6,59 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. Freie Ladungsträger, die durch ionisierte Oberflächenzustände und Störstellen bereitgestellt werden, sind in der Lage, sich zu den Grenzflächen zu bewegen, um dort σ_P teilweise zu kompensieren. In Abhängigkeit von den Schichtdicken und Polarisationsgradienten kann die Leitungsbandunterkante an der GF dann unter bzw. die Valenzbandoberkante oberhalb der Fermienergie liegen und es kommt hier zur Ausbildung eines zweidimensionalen Elektronen- (2DEG) bzw. Löchergases (2DHG). Bei gegebenem Potentialverlauf ergibt sich die Ladungsverteilung aus der Poissongleichung:

$$\rho(\vec{r}) = \nabla \vec{D} = \nabla(\varepsilon \vec{E} + \vec{P}) = -\nabla \varepsilon(\vec{r}) \Delta V(\vec{r}) + \nabla \vec{P}(\vec{r}) \quad (3.18)$$

mit $V(\vec{r})$ als ortsabhängigem elektrostatischem Hartree-Potential. Durch selbstkonsistentes Lösen der Schrödinger- und der Poissongleichung lassen sich Potentialverlauf und Ladungsträgerverteilung für eine beliebige Schichtabfolge unter Berücksichtigung des Einflusses der Polarisation bestimmen [76]. Abbildung 3.6 demonstriert diesen Sachverhalt anhand einer c -achsenorientierten, (Al,Ga)-polaren Al_{0,33}GaN_{0,67}N/GaN-Heterostruktur mit 20 nm Barrierendicke. An der AlGa_N/GaN-GF bildet sich ein tiefer dreiecksähnlicher Potentialtopf, in dem sich Elektronen sammeln. Diese besitzen eine sehr scharfe räumliche

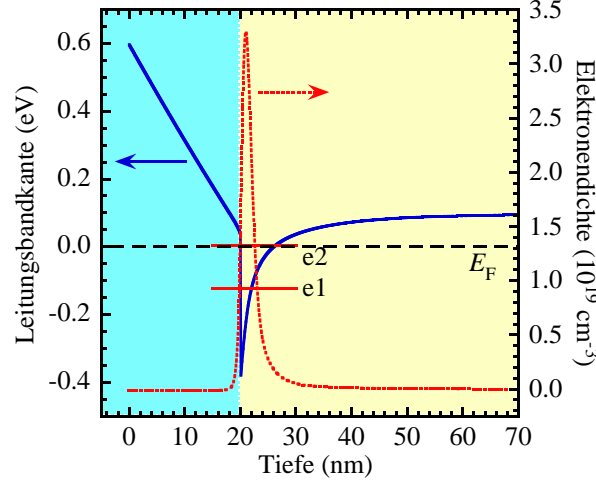


Abbildung 3.6: Leitungsbandkante (blau) und Elektronenkonzentration (rot) einer $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{N}/\text{GaN}$ -Heterostruktur mit 20 nm Barrierendicke. Fermienergie (schwarz gestrichelt) und unterste elektronische Subniveaus (rot).

Verteilung, deren Schwerpunkt 1-2 nm unterhalb der GF liegt. Wegen der starken räumlichen Einschränkung in Wachstumsrichtung, welche zu quantisierten Energiezuständen für die Elektronen führt, spricht man von einem zweidimensionalen Elektronengas. Auch ohne das Material zu dotieren, erreicht man Flächendichten von einigen 10^{12} bis 10^{13} cm^{-2} . Durch die hohe Ladungsträgerdichte wird die Leitungsbandkante an der GF nahe dem Fermi-niveau festgehalten. Das Potential an der OF ist durch Oberflächendonatorzustände festgelegt, welche gleichzeitig Ladungsträger für das Elektronengas bereitstellen und die Polarisationsladung an der OF teilweise aufheben [77]. Die elektrische Feldstärke F_b im AlGaN ist damit nahezu umgekehrt proportional zur Barriertiefe d_b . Da Barriertiefe und Al-Gehalt in direktem Zusammenhang mit F_b und ΔP stehen, sind sie maßgeblich für die Höhe der Elektronenkonzentration im 2DEG.

Kapitel 4

Optische Untersuchungsmethoden

4.1 Spektroskopische Ellipsometrie

4.1.1 Theoretische Grundlagen

Eine sehr gut geeignete Methode, um die dielektrische Funktion eines Materials zu bestimmen, ist die Spektralellipsometrie. Sie stellt gleichwohl ein effektives Verfahren zur Bestimmung von Schichtdicken dar.

Bei der Ellipsometrie benutzt man möglichst paralleles Licht, so daß man von ebenen elektromagnetischen Wellen ausgehen kann. Diese sind eine transversale Lösung der Maxwellgleichungen und haben die Form

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \quad (4.1)$$

mit dem Vektor des elektrischen Feldes \vec{E} und dem Wellenvektor \vec{k} . Trifft eine solche ebene Welle auf eine Grenzfläche, so läßt sie sich, wie in Abbildung 4.1 gezeigt, vektoriell in eine Komponente, bei der das \vec{E} -Feld senkrecht zur Einfallsebene (aufgespannt durch einfallenden Strahl und Einfallslot) schwingt, und eine Komponente mit parallelem \vec{E} -Feld zerlegen. Man kann schreiben

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} \hat{E}_p \\ \hat{E}_s \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Trifft eine solche Welle auf die Grenzfläche zwischen zwei Medien, so wird ein Teil davon in Medium 0 reflektiert, der andere Teil wird gebrochen und dringt in das Medium 1 ein. Dabei ist im allgemeinen ein unterschiedliches Verhalten von paralleler und senkrechter

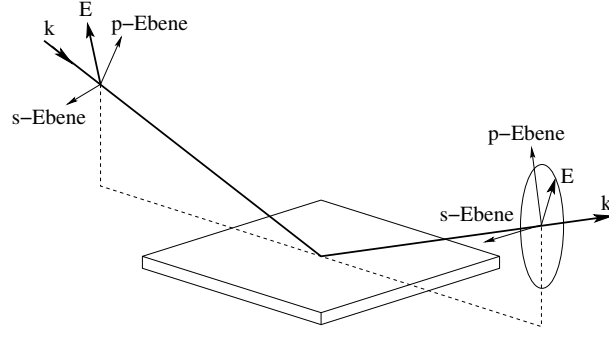


Abbildung 4.1: Strahlgeometrie für Ellipsometrie. Polarisation anfangs linear, nach der Reflexion elliptisch.

Feldkomponente zu beobachten. Die Vorgänge an den GF lassen sich mit den Gleichungen

$$\begin{pmatrix} \hat{E}_p \\ \hat{E}_s \end{pmatrix}_r = \begin{pmatrix} \hat{r}_{pp} & \hat{r}_{ps} \\ \hat{r}_{sp} & \hat{r}_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{E}_p \\ \hat{E}_s \end{pmatrix}_i \quad (4.3)$$

$$\begin{pmatrix} \hat{E}_p \\ \hat{E}_s \end{pmatrix}_t = \begin{pmatrix} \hat{t}_{pp} & \hat{t}_{ps} \\ \hat{t}_{sp} & \hat{t}_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{E}_p \\ \hat{E}_s \end{pmatrix}_i \quad (4.4)$$

beschreiben. Die Indizes i, r und t bezeichnen einfallende, reflektierte und transmittierte Feldkomponenten. Die (2×2) -Matrizen enthalten die komplexen Fresnelkoeffizienten für die Reflexion und die Transmission und geben damit die jeweiligen Verhältnisse von der reflektierten bzw. transmittierten zur einfallenden Komponente an. Unter Vernachlässigung von Streueffekten und unter der Annahme optisch isotroper Medien nehmen die Nichtdiagonalelemente den Wert Null an. Die einzelnen Fresnelkoeffizienten lassen sich aus dem Snelliusschen Brechungsgesetz

$$\hat{n}_0 \sin \theta_0 = \hat{n}_1 \sin \hat{\theta}_1 \quad (4.5)$$

und den Stetigkeitsbedingungen der Feldkomponenten an Grenzflächen gewinnen. θ symbolisiert den Winkel zwischen Einfallslot und Ausbreitungsrichtung. Es ergibt sich:

$$\hat{r}_p = \frac{\hat{n}_1 \cos \theta_0 - \hat{n}_0 \cos \hat{\theta}_1}{\hat{n}_1 \cos \theta_0 + \hat{n}_0 \cos \hat{\theta}_1}, \quad (4.6)$$

$$\hat{r}_s = \frac{\hat{n}_0 \cos \theta_0 - \hat{n}_1 \cos \hat{\theta}_1}{\hat{n}_0 \cos \theta_0 + \hat{n}_1 \cos \hat{\theta}_1}, \quad (4.7)$$

$$\hat{t}_p = \frac{2\hat{n}_0 \cos \theta_0}{\hat{n}_1 \cos \theta_0 + \hat{n}_0 \cos \hat{\theta}_1}, \quad (4.8)$$

$$\hat{t}_s = \frac{2\hat{n}_0 \cos \theta_0}{\hat{n}_0 \cos \theta_0 + \hat{n}_1 \cos \hat{\theta}_1}. \quad (4.9)$$

4.1. SPEKTROSKOPISCHE ELLIPSOMETRIE

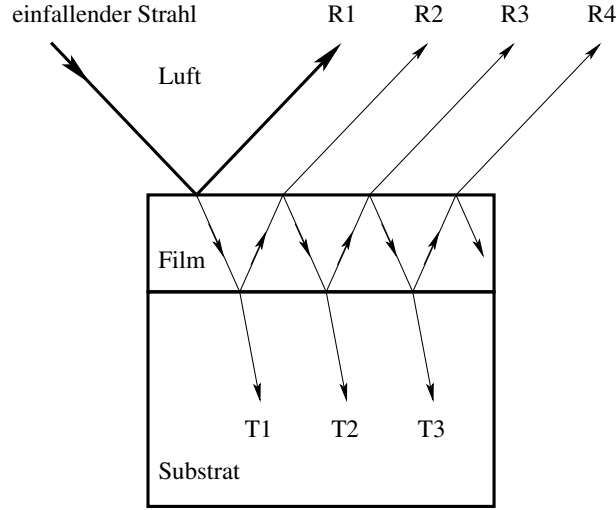


Abbildung 4.2: Vielfachreflexion (R) und Transmission (T) für dünnen Film auf halbumendlichem Substrat.

Um die Reflektivitäten und Transmittivitäten zu erhalten, hat man das Betragsquadrat der komplexen Fresnelkoeffizienten zu bilden.

Hat man ein System aus mehreren ebenen Schichten, ist der Sachverhalt komplizierter, da es hier an jeder einzelnen GF zu Vielfachreflexionen kommen kann. Im folgenden sei wie in Abbildung 4.2 dargestellt ein einzelner dünner Film (Medium 1) der Dicke d auf einem halbumendlichen Substrat (Medium 2) im umgebenden Medium 0 betrachtet. Die Abbildung zeigt die angesprochenen Vielfachreflexionen, wenn ein Lichtstrahl auf eine derartige Probe fällt. Die Feldstärke von jedem der eingezeichneten Teilstrahlen ergibt sich durch die entsprechende (gegebenenfalls mehrfache) Multiplikation der oben eingeführten (2×2) -Matrizen (Gleichungen (4.3) und (4.4)). Die einzelnen reflektierten Strahlen unterscheiden sich aufgrund der verschiedenen optischen Wege in ihrer Phasenlage. Da sich die Wegdifferenz aus dem mehrfachen Durchlaufen des Films ergibt, ist es zweckmäßig, eine Phasendicke β mit

$$\begin{aligned} \beta &= \hat{n}_1 d \cdot k \cos \hat{\theta}_1 = kd \cdot \hat{n}_1 \sqrt{1 - \sin^2 \hat{\theta}_1} = kd \cdot \hat{n}_1 \sqrt{1 - \frac{\hat{n}_0^2 \sin^2 \theta_0}{\hat{n}_1^2}} \\ &= \frac{2\pi}{\lambda} d \cdot \sqrt{\hat{n}_1^2 - \hat{n}_0^2 \sin^2 \theta_0} \end{aligned} \quad (4.10)$$

einzuführen. Die gesamte reflektierte Feldstärke erhält man durch phasenrichtiges Aufsummieren der einzelnen Teilstrahlen:

$$\hat{E}_{r,\text{total}} = \left(\hat{r}_{01} + \hat{t}_{10} \hat{t}_{01} e^{-i2\beta} \sum_{\nu=2}^{\infty} (\hat{r}_{10})^{\nu-2} (\hat{r}_{12})^{\nu-2} e^{i2\beta} \right) \hat{E}_i. \quad (4.11)$$

Die Indizes der Fresnelkoeffizienten bezeichnen jeweils die GF zwischen den entsprechenden Medien. Da mit steigender Anzahl an Grenzflächenkontakten die Feldstärke des betreffenden Strahl schnell abnimmt, bilden die Glieder in der Summe von Gleichung (4.11) eine konvergente Reihe. Unter Ausnutzung der Nebenbedingungen

$$\hat{r}_{01} = -\hat{r}_{10}, \quad (4.12)$$

$$\hat{t}_{10}\hat{t}_{01} = 1 - \hat{r}_{01}^2 \quad (4.13)$$

erhält man

$$\hat{E}_{r,\text{total}} = \left(\frac{\hat{r}_{01} + \hat{r}_{12}e^{i2\beta}}{1 + \hat{r}_{01}\hat{r}_{12}e^{i2\beta}} \right) \hat{E}_i. \quad (4.14)$$

Die Fresnelkoeffizienten der Reflexion, welche das Gesamtsystem beschreiben, sind hiermit durch

$$\langle \hat{r}_p \rangle \equiv \frac{\hat{E}_{p,r,\text{total}}}{E_{p,i}} = \frac{\hat{r}_{p,01} + \hat{r}_{p,12}e^{i2\beta}}{1 + \hat{r}_{p,01}\hat{r}_{p,12}e^{i2\beta}}, \quad (4.15)$$

$$\langle \hat{r}_s \rangle \equiv \frac{\hat{E}_{s,r,\text{total}}}{E_{s,i}} = \frac{\hat{r}_{s,01} + \hat{r}_{s,12}e^{i2\beta}}{1 + \hat{r}_{s,01}\hat{r}_{s,12}e^{i2\beta}} \quad (4.16)$$

gegeben. Ähnliche Überlegungen können auch für die Transmission angestellt werden. Das Beispiel zeigt, daß der Rechenaufwand bei einem Dreischichtmodell noch akzeptabel ist. Für eine steigende Anzahl von Schichten wird die Berechnung nach dieser Methode allerdings schnell unüberschaubar. Daher geht man in einem solchen Fall zu einer Transfermatrixmethode über, bei der jede Schicht durch eine charakteristische Matrix dargestellt wird, welche die Feldkomponenten ober- und unterhalb der Schicht miteinander verknüpft. Für isotrope Medien sind dies (2×2) -Matrizen, während für die Betrachtung von optisch anisotropen Medien und Depolarisationseffekten (4×4) -Matrizen notwendig sind.

Die zu berechnenden Fresnelkoeffizienten des Gesamtsystems sind mit den ellipsometrischen Meßgrößen Ψ und Δ über den Zusammenhang

$$\rho = \frac{\langle \hat{r}_p \rangle}{\langle \hat{r}_s \rangle} = \frac{|\langle \hat{r}_p \rangle|}{|\langle \hat{r}_s \rangle|} e^{i(\delta_p - \delta_s)} = \tan \Psi e^{i\Delta} \quad (4.17)$$

verbunden. Der Tangens von Ψ gibt dabei das Verhältnis der Beträge der komplexen Fresnelkoeffizienten wieder, während Δ ihren Phasenunterschied symbolisiert.

Untersucht man eine unbekannte Probe, so hat man für jede enthaltene Schicht drei unbekannte Größen – Realteil ε_1 und Imaginärteil ε_2 der DF sowie die Schichtdicke d . Durch die Messung sind jedoch nur Ψ , Δ und der Einfallswinkel θ bekannt. Somit ist das System außer für ein einzelnes halbbunendliches Medium unterbestimmt. Einen Ausweg bietet die Messung unter verschiedenen Einfallswinkeln. Hierdurch variiert man jeweils den optischen Weg durch die Schichten bzw. die Phasendicken β und kann damit alle zu bestimmenden Größen ermitteln.

4.1. SPEKTROSKOPISCHE ELLIPSOMETRIE

4.1.2 Experimenteller Aufbau

Laborellipsometer

Ellipsometer gibt es in verschiedenen Ausführungen. Das in dieser Arbeit verwendete Laborellipsometer ist in Abbildung 4.3 schematisch dargestellt. Als Lichtquelle dient eine Xenon-Höchstdrucklampe mit nachgeschaltetem Monochromator. So werden energieaufgelöste Messungen in einem Spektralbereich von 0,74 – 5,5 eV ermöglicht. Ein Polarisator sorgt für eine lineare Polarisierung des auf die Probe treffenden Lichtes. Mit Hilfe eines Analysators, welcher typischerweise mit einer Frequenz von 10...60 Hz rotiert, und des Detektors wird der Polarisationszustand des von der Probe reflektierten Lichtes ermittelt. Das Ellipsometer arbeitet besonders empfindlich, wenn das am Detektor ankommende Licht nahezu zirkular polarisiert ist. Hingegen ist die Empfindlichkeit für nahezu linear polarisiertes Licht nur gering. Um diese Problematik zu umgehen, wird nach dem Polarisator noch ein computergesteuerter variabler Verzögerer (engl. *Retarder*) angebracht. Dadurch ist es möglich, den Polarisationszustand der einfallenden ebenen Welle in definierter Weise so zu verändern, daß die Messung stets mit größtmöglicher Genauigkeit erfolgen kann. Mit Hilfe des Verzögerers wird auch zwischen links- und rechtszirkular polarisiertem Licht unterschieden.

Die am Detektor gemessene Spannung wird bei der gegebenen Anordnung durch

$$U(t) = U_{\text{dc}} + a \cos(2\omega t) + b \sin(2\omega t) \quad (4.18)$$

beschrieben, wobei ω die Kreisfrequenz des Analysators ist. Das Signal enthält einen Gleichanteil, der von einer Wechselspannung überlagert wird. Die Signalform ist dabei

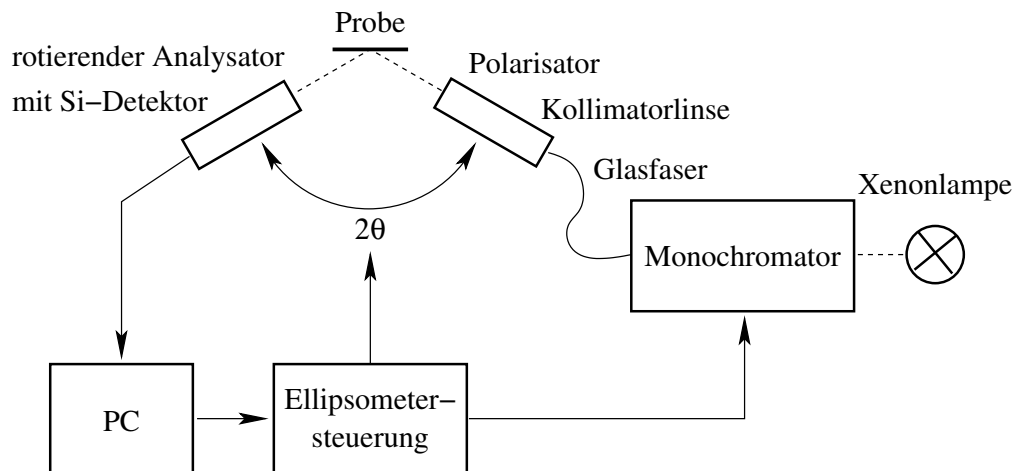


Abbildung 4.3: Schematischer Aufbau des Laborellipsometers.

vom Polarisationszustand des auf den Analysator auftreffenden Lichtes abhängig. Die Intensität am Detektor I_D ist dann

$$I_D \propto 1 + \alpha \cos(2A) + \beta \cos(2A) \quad (4.19)$$

mit A als Azimutwinkel des Analysators. Sie ist gleichzeitig proportional zum Betragsquadrat der elektrischen Feldstärke E_D am Detektor. Zu deren Berechnung hat man den Jones-Vektor eines einfallenden Lichtstrahls mit den Jones-Matrizen von Polarisator, Probe und Analysator zu multiplizieren. Bei der Multiplikation wird das Koordinatensystem jeweils in geeigneter Weise rotiert. Man erhält

$$E_D = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\text{Analysator}} \underbrace{\begin{pmatrix} \cos A & \sin A \\ -\sin A & \cos A \end{pmatrix}}_{\text{Probe}} \underbrace{\begin{pmatrix} \langle \hat{r}_p \rangle & 0 \\ 0 & \langle \hat{r}_s \rangle \end{pmatrix}}_{\text{einfallender Strahl}} \begin{pmatrix} \cos P & -\sin P \\ \sin P & \cos P \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

$$= \begin{pmatrix} \langle \hat{r}_p \rangle \cos A \cos P + \langle \hat{r}_s \rangle \sin A \sin P \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

mit P als Polarisatorwinkel. Damit gilt für die Intensität

$$\begin{aligned} I_D \propto E_D^2 &= (\langle \hat{r}_p \rangle \cos A \cos P + \langle \hat{r}_s \rangle \sin A \sin P)^2 \\ &= |\langle \hat{r}_p \rangle|^2 \cos^2 P \cos^2 A + |\langle \hat{r}_s \rangle|^2 \sin^2 P \sin^2 A + 2\Re\{\langle \hat{r}_p \rangle \langle \hat{r}_s \rangle^*\} \cos P \sin P \cos A \sin A \\ &= |\langle \hat{r}_p \rangle|^2 \cos^2 P \cdot \frac{1}{2}(1 + \cos 2A) + |\langle \hat{r}_s \rangle|^2 \sin^2 P \cdot \frac{1}{2}(1 - \cos 2A) \\ &\quad + \Re\{\langle \hat{r}_p \rangle \langle \hat{r}_s \rangle^*\} \sin P \cos P \sin 2A \\ &\propto |\langle \hat{r}_p \rangle|^2 \cos^2 P + |\langle \hat{r}_s \rangle|^2 \sin^2 P + (|\langle \hat{r}_p \rangle|^2 \cos^2 P - |\langle \hat{r}_p \rangle|^2 \sin^2 P) \cos(2A) \\ &\quad + 2\Re\{\langle \hat{r}_p \rangle \langle \hat{r}_s \rangle^*\} \sin P \cos P \sin 2A \end{aligned} \quad (4.22)$$

Die Division mit $|\langle \hat{r}_s \rangle|^2 \cos^2 P$ und Substitution mit Hilfe von Gleichung (4.17) führt zu

$$\begin{aligned} I_D &\propto \tan^2 \Psi + \tan^2 P + (\tan^2 \Psi - \tan^2 P) \cos 2A + 2 \tan \Psi \cdot \Re\{e^{i\Delta}\} \tan P \sin 2A \\ &\propto 1 + \frac{\tan^2 \Psi - \tan^2 P}{\tan^2 \Psi + \tan^2 P} \cos 2A + \frac{2 \tan \Psi \cos \Delta \tan P}{\tan^2 \Psi + \tan^2 P} \sin 2A \end{aligned} \quad (4.23)$$

Der Vergleich mit Gleichung (4.19) ergibt für die Fourierkoeffizienten

$$\alpha = \frac{\tan^2 \Psi - \tan^2 P}{\tan^2 \Psi + \tan^2 P}, \quad (4.24)$$

$$\beta = \frac{2 \tan \Psi \cos \Delta \tan P}{\tan^2 \Psi + \tan^2 P}. \quad (4.25)$$

4.1. SPEKTROSKOPISCHE ELLIPSOMETRIE

Stellt man die Gleichungen um, so lassen sich Ψ und Δ aus den gemessenen Fourierkoeffizienten errechnen:

$$\tan \Psi = \sqrt{\frac{1+\alpha}{1-\alpha}} |\tan P|, \quad (4.26)$$

$$\cos \Delta = \frac{\beta}{\sqrt{1-\alpha^2}} \frac{\tan P}{|\tan P|}. \quad (4.27)$$

Bei der Ableitung wurde in Gleichung (4.20) von einer isotropen Probe ausgegangen, bei der die Nichtdiagonalelemente der Matrix Null sind. Im allgemeinen ist dies nicht der Fall und die Probenmatrix ist durch

$$\begin{pmatrix} \langle \hat{r}_{pp} \rangle & \langle \hat{r}_{ps} \rangle \\ \langle \hat{r}_{sp} \rangle & \langle \hat{r}_{ss} \rangle \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

zu ersetzen. Die Gleichungen (4.26) und (4.27) behalten weiterhin ihre Gültigkeit. Die Ableitung der Fourierkoeffizienten erfordert allerdings einen größeren mathematischen Aufwand und resultiert letztendlich in

$$\alpha = \frac{(|\langle \hat{r}_{pp} \rangle|^2 - |\langle \hat{r}_{sp} \rangle|^2) \cos^2 P + (|\langle \hat{r}_{ps} \rangle|^2 - |\langle \hat{r}_{ss} \rangle|^2) \sin^2 P + 2(\Re\{\langle \hat{r}_{pp} \rangle \langle \hat{r}_{ps} \rangle^*\} - \Re\{\langle \hat{r}_{ss} \rangle \langle \hat{r}_{sp} \rangle^*\}) \sin P \cos P}{(|\langle \hat{r}_{pp} \rangle|^2 + |\langle \hat{r}_{sp} \rangle|^2) \cos^2 P + (|\langle \hat{r}_{ps} \rangle|^2 + |\langle \hat{r}_{ss} \rangle|^2) \sin^2 P + 2(\Re\{\langle \hat{r}_{pp} \rangle \langle \hat{r}_{ps} \rangle^*\} + \Re\{\langle \hat{r}_{ss} \rangle \langle \hat{r}_{sp} \rangle^*\}) \sin P \cos P}, \quad (4.29)$$

$$\beta = \frac{2[\Re\{\langle \hat{r}_{pp} \rangle \langle \hat{r}_{sp} \rangle^*\} \cos^2 P + \Re\{\langle \hat{r}_{ss} \rangle \langle \hat{r}_{ps} \rangle^*\} \sin^2 P + (\Re\{\langle \hat{r}_{pp} \rangle \langle \hat{r}_{ps} \rangle^*\} + \Re\{\langle \hat{r}_{sp} \rangle \langle \hat{r}_{ps} \rangle^*\}) \sin P \cos P]}{(|\langle \hat{r}_{pp} \rangle|^2 + |\langle \hat{r}_{sp} \rangle|^2) \cos^2 P + (|\langle \hat{r}_{ps} \rangle|^2 + |\langle \hat{r}_{ss} \rangle|^2) \sin^2 P + 2(\Re\{\langle \hat{r}_{pp} \rangle \langle \hat{r}_{ps} \rangle^*\} + \Re\{\langle \hat{r}_{ss} \rangle \langle \hat{r}_{sp} \rangle^*\}) \sin P \cos P}. \quad (4.30)$$

Für eine korrekte Auswertung der Ellipsometriedaten, sind in einer Kalibrierungsprozedur noch drei Parameter zu bestimmen [78], der Absolutwinkel des Analysators A_0 und des Polarisators P_0 sowie ein Parameter η , welcher die Dämpfung des Wechselsignals gegenüber dem Gleichanteil beschreibt, verursacht durch die Auswerteelektronik. Die experimentell bestimmten α und β sind um A_0 und η zu korrigieren. Die korrigierten Fourierkoeffizienten sind dann

$$\alpha' = \eta(\alpha \cos 2A_0 + \beta \sin 2A_0), \quad (4.31)$$

$$\beta' = \eta(\beta \cos 2A_0 - \alpha \sin 2A_0). \quad (4.32)$$

Die Gleichungen (4.26) und (4.27) werden zu

$$\tan \Psi = \sqrt{\frac{1+\alpha'}{1-\alpha'}} |\tan(P - P_0)|, \quad (4.33)$$

$$\cos \Delta = \frac{\beta'}{\sqrt{1-\alpha'^2}} \frac{\tan(P - P_0)}{|\tan(P - P_0)|} \quad (4.34)$$

modifiziert. Mit den Gleichungen (4.31)–(4.34) ist man in der Lage, aus den gemessenen Fourierkoeffizienten des Detektorsignals die ellipsometrischen Parameter Ψ und Δ zu gewinnen, um sie mit aus einem optischen Modell generierten Daten nach Gleichung (4.17) zu vergleichen.

BESSY-Ellipsometer

Für eine Modellierung der DF von Nitridhalbleitern über einen ausgedehnten Spektralbereich ist der Energiebereich oberhalb von 5 eV von entscheidender Bedeutung. Da das Laborellipsometer nicht für solche Photonenenergien ausgelegt ist, wurde für den Bereich von 3,2 – 9,8 eV das Ellipsometer am Berliner Elektronenspeicherring für Synchrotronstrahlung (BESSY II) verwendet. Dieses basiert ebenfalls auf dem Prinzip des rotierenden Analysators. Das Licht wird dem Strahlrohr 3m-NIM1a entnommen und mittels eines Monochromators mit senkrechtem Einfall und 3m Fokallänge (3m-NIM: **3 Meter Normal Incidence Monochromator**) spektral zerlegt. Die austretende Synchrotronstrahlung hat eine hohe Intensität und einen kleinen Strahldurchmesser. Dadurch kann man kleine Spaltbreiten verwenden, was eine hohe Auflösung von ~ 5 meV bei 8 eV ermöglicht. Da es für solch hochenergetisches Licht kaum transparentes Fenstermaterial gibt, welches eine Abschottung des Probenraumes gegenüber dem Speicherring gewährleisten kann, befindet sich der gesamte Strahlengang einschließlich der Probe im Ultrahochvakuum (UHV) mit Drücken im Bereich von $< 10^{-7}$ mbar. Auch würden Gase bereits einen Großteil des Lichtes absorbieren. Das Arbeiten unter UHV-Bedingungen schränkt die experimentellen Möglichkeiten stark ein. So ist es z.B. nicht möglich, den Polarisator bezüglich seiner Polarisationsrichtung einzustellen. Vielmehr wird bei dem verwendeten Aufbau die gesamte Probenkammer mit Analysator gegenüber dem Polarisator verkippt. Auf diese Weise wird ein Polarisatorwinkel von $\sim 20^\circ$ erreicht. Der Einfallswinkel θ ist mit $67 - 68^\circ$ vorgegeben und nicht variabel. Unterhalb von 5 eV wird ein Quarzfilter verwendet, um höhere Ordnungen des Lichtes auszublenden. Oberhalb von 5 eV erfüllt der MgF_2 -Polarisator diese Funktion.

4.2 Photolumineszenz

Grundlagen

Eine verbreitete Methode zur Bestimmung optischer Übergänge nahe der Bandkante ist die Photolumineszenz (PL). Hierbei werden mittels eines Lasers, dessen Energie oberhalb der Bandlücke liegt, Elektron-Loch-Paare erzeugt. Die generierten Ladungsträger relaxieren durch inelastische Phononenstreuung zu den Bandkanten, um von dort unter Aussendung eines Photons zu rekombinieren. Haben Elektron und Loch den gleichen Impuls, spricht man von einem direkten Übergang. Befinden sie sich an verschiedenen Punkten im \vec{k} -Raum, handelt es sich um einen indirekten Übergang, welcher nur durch Absorption oder Emission eines Phonons möglich ist. Da es sich bei Gruppe-III-Nitriden um direkte

4.2. PHOTOLUMINESZENZ

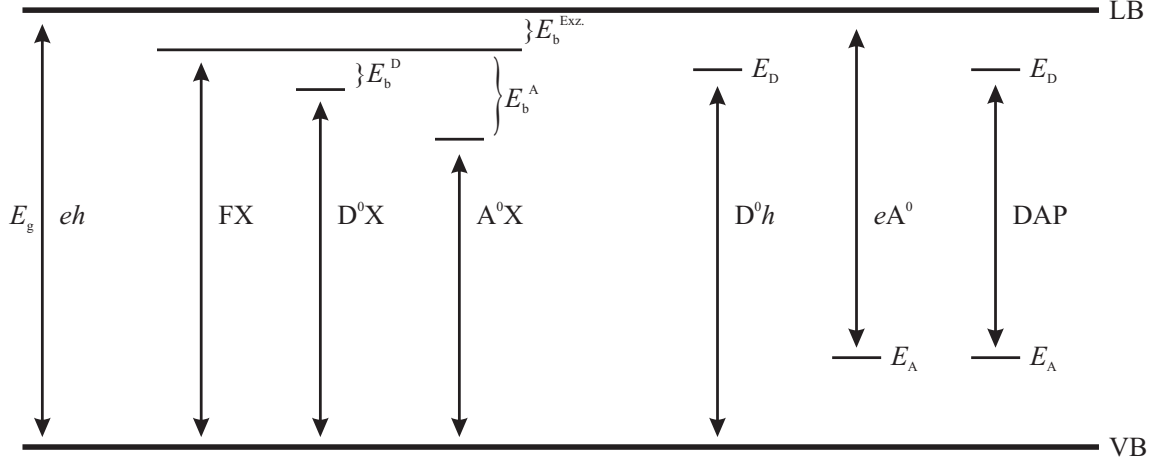


Abbildung 4.4: Möglichkeiten der strahlenden Rekombination im Halbleiter: Band-zu-Band-Übergang (eh), freies Exziton (FX), an neutralen Donator bzw. Akzeptor gebundenes Exziton (D^0X bzw. A^0X), Band-zu-Donator- bzw. Band-zu-Akzeptor-Übergang (D^0h bzw. eA^0) und Donator-Akzeptor-Paar-Übergang (DAP).

Halbleiter handelt, beschränken sich die Betrachtungen auf direkte Übergänge.

Abgesehen von sehr hohen Anregungsleistungen erfolgt die Rekombination jeweils nur von den niedrigsten Energiezuständen. Den beteiligten Energieniveaus entsprechend werden dabei mehrere Übergangsmöglichkeiten unterschieden (vgl. Abbildung 4.4). Beim Band-zu-Band-Übergang rekombiniert ein Elektron von der Leitungsbandunterkante mit einem Loch an der Valenzbandoberkante. Zu den Band-zu-Band-Übergängen (eh) mit der Übergangsenergie E_g gibt es die um die Exzitonenbindungsenergie erniedrigten Übergänge der freien Exzitonen (FX). Neben den freien Exzitonen existieren auch gebundene (D^0X , A^0X). Sie werden von Donatoren oder Akzeptoren durch die van-der-Waals-Wechselwirkung angezogen. Ihre Energie ist gegenüber FX um die Bindungsenergie an die Störstelle abgesenkt. Übergänge, die einen freien und einen gebundenen Zustand beinhalten, sind möglich, indem ein Elektron aus dem Leitungsband von einem neutralen Akzeptor eingefangen wird (eA^0) oder ein zunächst neutraler Donator ein Elektron an das Valenzband abgibt (D^0h). Befinden sich sowohl Donatoren als auch Akzeptoren in ausreichender Anzahl im Halbleiter, so lassen sich gegebenenfalls auch Donator-Akzeptor-Paar-Übergänge (DAP) beobachten, bei denen ein Elektron von einem neutralen Donator zu einem neutralen Akzeptor wechselt, wodurch beide Störstellen ionisiert werden. Zu beachten ist, daß die Darstellung in Abbildung 4.4 von einem Einteilchenbild ausgeht. Exzitonen existieren jedoch nur im Zweiteilchenbild, was das Einzeichnen exzitonic

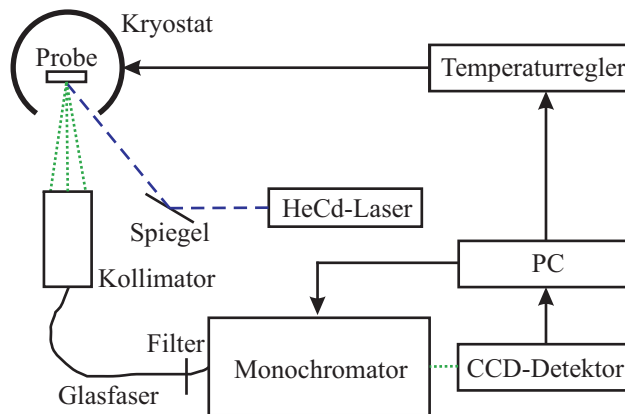


Abbildung 4.5: Schematische Darstellung des PL-Meßplatzes.

Niveaus in diese Abbildung streng genommen verbietet. Bei niederdimensionalen Strukturen werden die Übergänge zwischen den Subniveaus der Elektronen und Löcher beobachtet.

Experimenteller Aufbau

Der schematische Aufbau des Photolumineszenzmeßplatzes ist in Abbildung 4.5 ersichtlich. Für die Photolumineszenzexperimente befindet sich die Probe in einem Kryostat. Dieser wird bei Bedarf wahlweise von gasförmigem He oder N₂ durchströmt und ermöglicht Temperaturen im Bereich von 4 bis 300 K. Als Anregungsquelle wird die 325 nm-Linie eines HeCd-Lasers benutzt. Das Lumineszenzlicht der Probe wird von einem Kollimator aufgefangen und durch eine Glasfaser zum Monochromator geleitet. Ein vorgeschalteter Langpaßfilter blendet den Anregungslaser aus. Das spektral zerlegte Licht wird mit Hilfe eines stickstoffgekühlten CCD-Feldes detektiert.

4.3 Elektroreflexion

4.3.1 Prinzip der Elektroreflexion

Ein Nachteil der Photolumineszenz ist die rasch sinkende Intensität mit steigender Temperatur. Bei Raumtemperatur sind oft kaum noch Signale detektierbar. Ein weiterer Nachteil ist die Beschränkung auf den Grundzustand eines jeweiligen Systems. Mittels Modulationsspektroskopie lassen sich beide Handicaps umgehen.

Die kritischen Punkte der Bandstruktur spiegeln sich in der DF eines Halbleiters wie-

4.3. ELEKTROREFLEXION

der. Oftmals offenbaren sie sich hier jedoch nur als sehr breite Absorptionsbanden, sind wenig ausgeprägt und schwer mit hoher Energieauflösung zu bestimmen. Hat man jedoch die Chance, die Ableitung der DF zu messen, verschwindet der hohe Untergrund weitgehend und die CPBS sind als scharfe Signale zu erkennen. Die Modulationsspektroskopie beruht daher nicht auf der Messung der DF selbst, sondern auf der Bestimmung ihrer Änderung, wenn man eine externe Störung auf das System einwirken läßt. Die Störung kann z.B. eine Temperatur- (Thermoreflexion) oder Druckschwankung (Piezoreflexion) sein. Bei der Elektroreflexion (ER) werden durch eine extern angelegte Wechselspannung U_{ac} die internen elektrischen Felder in den Schichten der Probe moduliert. Optional wird zusätzlich noch eine Gleichspannung U_{dc} angelegt. Die hiermit verbundenen elektrischen Felder brechen entlang ihrer Richtung die Translationssymmetrie von Ladungsträgern. Daher sind sie in der Schrödingergleichung für die Elektronen und Löcher im Material zu berücksichtigen. Sie nehmen Einfluß auf die Energieeigenwerte und Wellenfunktionen der Ladungsträger und damit auch auf die Übergangsmatrixelemente, z.B. für Übergänge vom Valenz- ins Leitungsband. Dies wirkt sich auf die DF aus und führt gemäß den Fresnel-Formeln zu einer Änderung der Reflektivität ΔR . Die Meßgröße der ER ist

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R(U_{dc} + U_{ac}) - R(U_{dc} - U_{ac})}{R(U_{dc})}, \quad (4.35)$$

also die Änderung der Reflektivität, normiert auf die Reflektivität. Durch die Normierung auf den Gleichanteil R werden etwaige Intensitätsschwankungen und spektrale Charakteristiken des Meßlichtes, Streuungen an den optischen Elementen im Strahlengang, die spektrale Empfindlichkeit des Detektors u.ä. ausgeglichen, da diese dann als (wellenlängenabhängiger) Faktor sowohl im Zähler als auch im Nenner der Meßgröße vorkommen. Typische Signale liegen im Bereich $\frac{\Delta R}{R} \sim 10^{-3} \dots 10^{-5}$. Damit handelt es sich um ein sehr empfindliches Verfahren zur Detektion von CPBS.

Der Zusammenhang zwischen dem ER-Signal und der Änderung der DF kann in allgemeiner Form durch die Seraphinkoeffizienten α_S und β_S ausgedrückt werden [79, 80]:

$$\frac{\Delta R}{R} = \alpha_S(\varepsilon_1, \varepsilon_2)\Delta\varepsilon_1 + \beta_S(\varepsilon_1, \varepsilon_2)\Delta\varepsilon_2 = \Re\{\hat{C}_S\Delta\hat{\varepsilon}\}. \quad (4.36)$$

Die Seraphinkoeffizienten sind dabei als

$$\alpha_S = \frac{\partial \ln R}{\partial \varepsilon_1}, \quad (4.37)$$

$$\beta_S = \frac{\partial \ln R}{\partial \varepsilon_2}, \quad (4.38)$$

$$\hat{C}_S = \alpha_S - i\beta_S \quad (4.39)$$

definiert. Für den Fall zweier halbumendlicher Medien können sie leicht berechnet werden. Für Schichtsysteme ist dies aufgrund von Interferenzerscheinungen und Vielfachreflexionen komplizierter.

4.3.2 Experimenteller Aufbau

Der schematische Aufbau des ER-Meßplatzes ist in Abbildung 4.6 dargestellt. Die Probe befindet sich im He- bzw. N₂-Gasfluß eines Kryostaten, was temperaturabhängige Messungen zwischen $T = 5$ K und Raumtemperatur (RT) ermöglicht. Voraussetzung für die ER sind ein ohmscher Kontakt und ein semitransparenter Schottkykontakt auf der Probe. Zwischen diesen wird mittels eines Funktionsgenerators eine Wechselspannung U_{ac} in Form eines Rechtecksignals angelegt. Neben dem Wechsellsignal kann auch eine zusätzliche Gleichspannung U_{dc} angelegt werden, um die elektrischen Felder in der Probe beliebig durchzustimmen. Eine 150 W-Xenonbogenlampe wird als Meßlichtquelle verwendet. Ihr Licht wird in einem Monochromator spektral zerlegt und durch eine Linse unter nahezu senkrechtem Einfall direkt auf den Schottkykontakt der Probe fokussiert. Das reflektierte Licht gelangt zu einer Si-Photodiode. Der in der Diode erzeugte Photostrom besteht aus einem Gleichanteil, der proportional zu R ist, und einem Wechselanteil, proportional zu

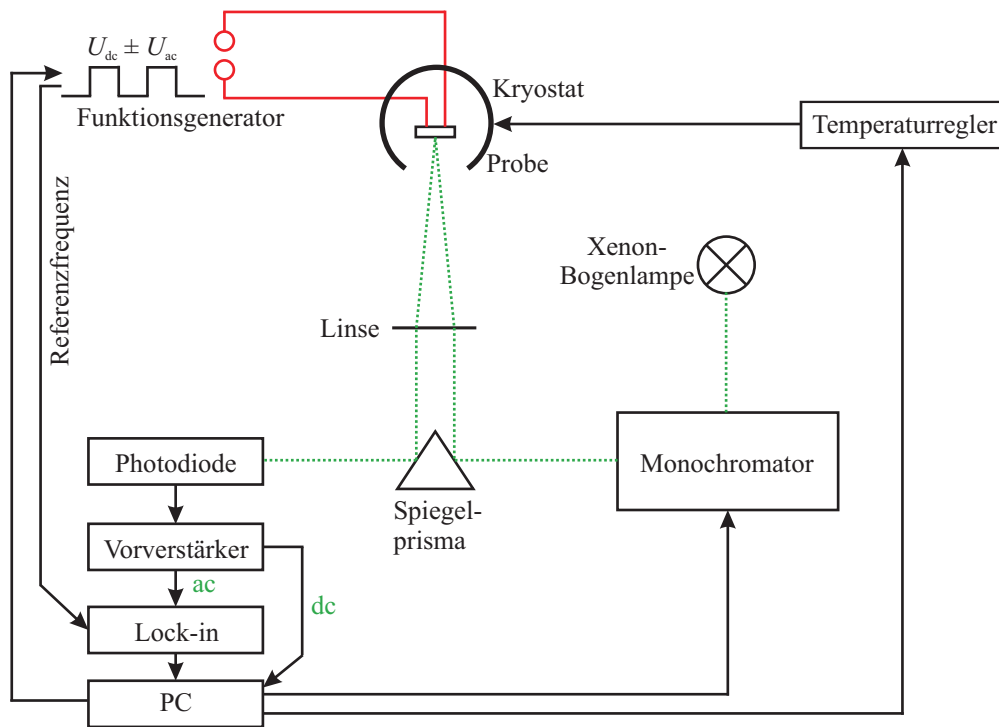


Abbildung 4.6: Schematischer Aufbau des ER-Meßplatzes.

4.3. ELEKTROREFLEXION

ΔR . Ein Vorverstärker separiert diese Stromanteile und wandelt sie in Spannungen um. Die Höhe des Gleichanteils wird direkt als Kanal B an den PC übermittelt. Der Wechselanteil wird phasenempfindlich mit einem Lockin-Verstärker nachgewiesen. Vom Eingangssignal verstärkt dieser nur eine bestimmte Frequenz, welche hier vom Referenzsignal des Funktionsgenerators vorgegeben wird. Der Lockin-Verstärker gibt eine Gleichspannung aus, welche ein Maß für das Wechsellsignal am Detektor ist, welches die Referenzfrequenz besitzt. Der PC verarbeitet diese Spannung als Meßkanal A. Die anschließende Division mit Kanal B ergibt das ER-Signal $\frac{\Delta R}{R}$.

4.3.3 Auswertung der ER-Spektren

Niedrigfeldnäherung

Betrachtet man einen diskreten exzitonischen Übergang bei Feldstärken, die klein sind gegenüber der Ionisationsfeldstärke, so kann man dessen DF als verbreiterte Deltafunktion ansehen. Je nach Verbreiterungsmechanismus kann die Verbreiterung die Form einer Lorentz- oder einer Gaußfunktion haben. Die Beschreibung eines diskreten Exzitonbeitrags zur DF mittels eines Lorentzoszillators ergibt sich aus

$$\hat{\epsilon}_{\text{FX}} = \frac{I}{E - E_t + i\Gamma}. \quad (4.40)$$

I stellt hierbei die Amplitude, E_t die Übergangsenergie und Γ einen phänomenologischen Verbreiterungsparameter dar. Die Änderung der exzitonischen DF bei einer kleinen Variation der elektrischen Feldstärke ergibt sich formal zu

$$\Delta \hat{\epsilon}_{\text{FX}} = \left(\frac{\partial \hat{\epsilon}_{\text{FX}}}{\partial I} \cdot \frac{\partial I}{\partial F} + \frac{\partial \hat{\epsilon}_{\text{FX}}}{\partial E_t} \cdot \frac{\partial E_t}{\partial F} + \frac{\partial \hat{\epsilon}_{\text{FX}}}{\partial \Gamma} \cdot \frac{\partial \Gamma}{\partial F} \right) \cdot \Delta F. \quad (4.41)$$

Kennt man die Abhängigkeit der einzelnen Größen von F , so läßt sich $\Delta \hat{\epsilon}_{\text{FX}}$ berechnen. Geht man davon aus, daß die Änderung der DF im Wesentlichen durch die Modulation von E_t bestimmt ist, dann gilt

$$\Delta \hat{\epsilon}_{\text{FX}} = \frac{I}{(E - E_t + i\Gamma)^2}. \quad (4.42)$$

Der zugrunde liegende Mechanismus ist die Starkverschiebung durch den Feldeinfluß. Eine detaillierte Beschreibung von Exzitonen im elektrischen Feld findet sich in [76]. Das resultierende ER-Signal erhält die Form

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{C e^{i\varphi}}{(E - E_t + i\Gamma)^2}. \quad (4.43)$$

C beschreibt die Amplitude des Signals und φ einen Phasenwinkel, der einerseits von der Art des Übergangs und andererseits vom optischen Weg durch die Probe sowie einer Phasenverschiebung durch die Auswerteelektronik abhängt.

Für Band-zu-Band-Übergänge lassen sich ähnliche Überlegungen anstellen, welche in der Linienform

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{C e^{i\varphi}}{(E - E_t + i\Gamma)^{m/2}} \quad (4.44)$$

resultieren. Der Unterschied besteht lediglich im Exponenten m des Nenners. Für einen dreidimensionalen M_0 -kritischen Punkt gilt $m = 5$, für einen zwei- oder eindimensionalen CPBS ist $m = 6$ bzw. $m = 7$ [81, 82].

Liegen mehrere optische Übergänge energetisch dicht beieinander, kommt es zu einer additiven Überlagerung der einzelnen Beiträge im ER-Signal.

Franz-Keldysh-Oszillationen und Feldstärkebestimmung

Gewöhnlich existieren in Halbleiterheterostrukturen elektrische Felder. Ursache hierfür sind beispielsweise Oberflächenbandverbiegungen, Polarisationsladungen und Dotierprofile. Wie in Abschnitt 4.3.1 angedeutet, heben diese die Translationssymmetrie bezüglich der Bewegung von Ladungsträgern auf. Dies wirkt sich auf die Elektron-Loch-Wellenfunktionen und letztendlich auf die DF aus. In Nitridhalbleitern sind elektrische Feldstärken von mehreren 100 kV/cm bis zu einigen MV/cm keine Seltenheit. Exzitonen sind bei derartig hohen Feldstärken bereits ionisiert. Dennoch haben sie eine große Auswirkung auf die Form und Amplitude der DF. Man müßte die Änderung der DF mit Berücksichtigung des Exzitonenbeitrags unter dem Einfluß eines elektrischen Feldes betrachten [83, 84]. Dies ist nur unter großem numerischen und rechentechnischen Aufwand möglich. Es hat sich allerdings gezeigt, daß es zur Auswertung der ER-Spektren ausreichend ist, nur das Band-Band-Verhalten im Einteilchenbild zu behandeln [76]. Dies geschah erstmals durch Franz [85] und Keldysh [86]. Den Einfluß großer elektrischer Felder auf die Absorptionskante bezeichnet man daher als Franz-Keldysh-Effekt. Der Ausgangspunkt für die Berechnung des Einflusses eines elektrischen Feldes auf die Elektron-Loch-Wellenfunktion $\phi(\vec{r})$ ist die Schrödingergleichung

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\mu_r^*} \Delta_{\vec{r}} + e\vec{F}\vec{r} + E_r \right) \phi(\vec{r}) = 0, \quad (4.45)$$

wobei \vec{F} der Vektor des elektrischen Feldes ist und μ_r^* die reduzierte effektive Interbandmasse nach Gleichung (2.38) für die jeweilige Richtung angibt. Unter der Voraussetzung, daß das elektrische Feld nur in z -Richtung wirkt, findet ein Separationsansatz Anwendung. Die Gleichungen für die x - und die y -Richtung haben ebene Wellen als Lösung. Für

4.3. ELEKTROREFLEXION

die z -Richtung ist das verbleibende Problem

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\mu_z^*} \frac{d^2}{dz^2} + eF_z z + E_z \right) \phi(z) = 0 \quad (4.46)$$

zu lösen. Nach einer Koordinatentransformation geht Gleichung (4.46) in

$$\frac{d^2 \phi(\xi)}{d\xi^2} = -\xi \phi(\xi) \quad (4.47)$$

über. Die dimensionslose Größe ξ erhält man durch

$$\xi = \frac{E_z}{\hbar\Theta} - z \left(2 \frac{\mu_z^* e |F_z|}{\hbar^2} \right)^{1/3} \quad (4.48)$$

mit der elektrooptischen Energie

$$\hbar\Theta = \left(\frac{e^2 F_z^2 \hbar^2}{2\mu_z^*} \right)^{1/3}. \quad (4.49)$$

Die Lösungen von Gleichung (4.47) sind Airyfunktionen $\text{Ai}(\xi)$:

$$\phi_{E_z}(\xi) = \frac{e|F|}{\hbar\Theta} \text{Ai}(\xi). \quad (4.50)$$

In Abbildung 4.7 sind Valenz- und Leitungsband mit elektrischem Feld zu sehen. In das Bänderschema wurden ein Elektronen- und ein Löcherniveau mit ihrer entsprechenden Wellenfunktion (WF) eingezeichnet. Durch den Einfluß des elektrischen Feldes ist das Betragsquadrat der WF innerhalb der Bandlücke nicht Null und die Ladungsträger können in den ansonsten verbotenen Bereich hineintunneln. Es sind nun bereits optische Übergänge für Energien unterhalb von E_g möglich. Aufgrund der sich rasch verringernden Aufenthaltswahrscheinlichkeit innerhalb der Bandlücke, nimmt die Absorption zu niedrigeren Energien exponentiell ab. Das beobachtete Phänomen ist umso ausgeprägter, je höher das elektrische Feld ist. Mit der Kenntnis der Wellenfunktion läßt sich der Imaginärteil der DF $\varepsilon_2(\omega, F)$ unter dem Einfluß eines elektrischen Feldes berechnen [87]. Für einen dreidimensionalen M_0 -kritischen Punkt (z.B. die Bandlücke von GaN und AlN) erhält man unter der Annahme einer parabolischen Bandstruktur

$$\varepsilon_2(\omega, F) = \frac{2\pi e^2 (2\mu^*)^{3/2} P^2 \sqrt{\hbar\Theta}}{m_0^2 \hbar^3 \omega^2} [\text{Ai}'^2(\eta) - \eta \text{Ai}^2(\eta)] \quad (4.51)$$

mit

$$\eta = \frac{E_g - \hbar\omega}{\hbar\Theta}. \quad (4.52)$$

Hierbei bezeichnet m_0 die freie Elektronenmasse und P das Impulsmatrixelement des feldfreien Halbleiters gemäß

$$|P|^2 = |\langle \phi_k^C | \vec{e} \cdot \vec{p} | \phi_k^V \rangle|^2. \quad (4.53)$$

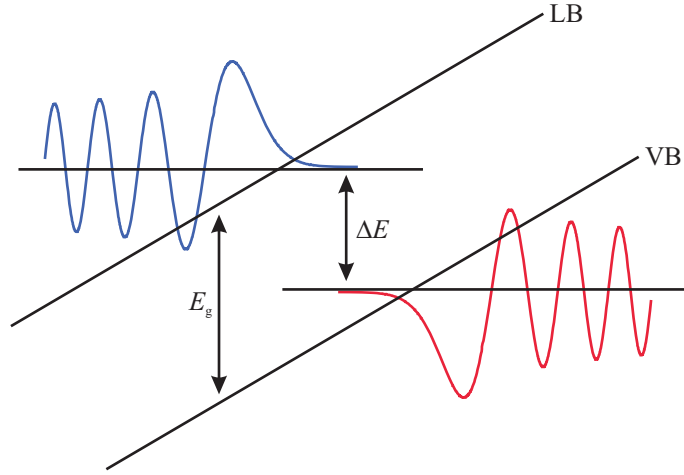


Abbildung 4.7: Bänderschema mit Wellenfunktion von Elektron und Loch im elektrischen Feld.

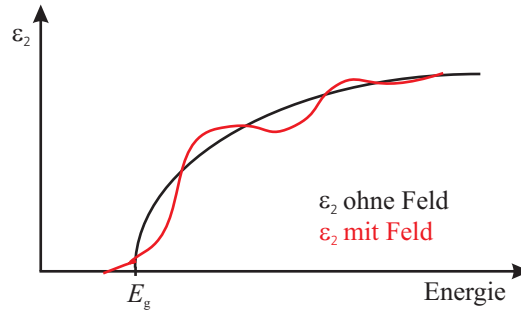


Abbildung 4.8: Imaginärteil der DF ohne (schwarz) und mit elektrischem Feld (rot) im Einteilchenbild.

Der Einfluß von F auf die DF wird in Abbildung 4.8 veranschaulicht. Die schwarze Kurve zeigt den Imaginärteil der DF ohne elektrisches Feld. Sie gibt die erwartete wurzelförmige Energieabhängigkeit an der Bandlücke wieder (siehe Gleichung (2.47)). Das qualitative Verhalten bei hohen Feldstärken wird durch die rote Kurve symbolisiert. Man erkennt einen deutlichen Ausläufer von ε_2 unterhalb der Bandkante, während die Kurve für Energien oberhalb von E_g um die feldfreie DF herum oszilliert. Die Änderung der DF durch das elektrische Feld ergibt sich dann einfach aus der Differenz von $\varepsilon_2(\omega, F)$ und $\varepsilon_2(\omega, 0)$:

$$\Delta\varepsilon_2(\omega, F) = \frac{2e^2(2\mu^*)^{3/2}P^2\sqrt{\hbar\Theta}}{m_0^2\hbar^3\omega^2}\mathcal{F}\left(\frac{E_g - \hbar\omega}{\hbar\Theta}\right). \quad (4.54)$$

Die Funktion \mathcal{F} ist dabei definiert als

$$\mathcal{F}(\eta) = \pi[\text{Ai}'^2(\eta) - \eta\text{Ai}^2(\eta)] - \sqrt{-\eta}\mathcal{H}(-\eta). \quad (4.55)$$

4.3. ELEKTROREFLEXION

Die Kramers-Kronig-Transformation liefert mit

$$\Delta\varepsilon_1(\omega, F) = \frac{2e^2(2\mu^*)^{3/2}P^2\sqrt{\hbar\Theta}}{m_0^2\hbar^3\omega^2}\mathcal{G}\left(\frac{E_g - \hbar\omega}{\hbar\Theta}\right) \quad (4.56)$$

und

$$\mathcal{G}(\eta) = \pi[\text{Ai}'(\eta)\text{Bi}'(\eta) - \eta\text{Ai}(\eta)\text{Bi}(\eta)] + \sqrt{\eta}\mathcal{H}(\eta) \quad (4.57)$$

das Ergebnis für die Änderung des Realteils der DF. $\text{Bi}(\eta)$ ist die modifizierte Airy-funktion, deren Lösungen für $n \rightarrow \infty$ divergieren. \mathcal{F} und \mathcal{G} werden als elektrooptische Funktionen bezeichnet.

Bei den bisherigen Betrachtungen ist die Lebensdauer verbreiterung der Übergänge noch nicht berücksichtigt worden. Dieser Effekt kann durch die Einführung von Airy-funktionen komplexer Variablen behandelt werden [88, 89].

Aus Gleichung (4.54) folgt für das Elektroreflexionssignal eine scharfe Spitze bei der Übergangsenergie E_g mit schnellem Abklingen unterhalb und oszillatorischem Verhalten oberhalb von E_g . Man spricht hierbei auch von Franz-Keldysh-Oszillationen (FKO).

Im Bereich der Oszillationen können die Airyfunktionen für große $|\eta|$ asymptotisch angenähert werden. Das ER-Signal hat hier die Form [90]

$$\frac{\Delta R}{R} \propto \frac{1}{\hbar^2\omega^2(\hbar\omega - E_g)} \exp\left(-\frac{2\sqrt{\hbar\omega - E_g}\Gamma}{(\hbar\Theta)^{3/2}}\right) \cdot \cos\left[\chi + \frac{4}{3}\left(\frac{\hbar\omega - E_g}{\hbar\Theta}\right)^{3/2}\right]. \quad (4.58)$$

Die Extrema sind durch die Kosinusfunktion bestimmt und befinden sich an Stellen, an denen das Argument ein Vielfaches von π ist. Somit erhält man

$$\nu\pi = \chi + \frac{4}{3}\left(\frac{\hbar\omega - E_g}{\hbar\Theta}\right)^{3/2}. \quad (4.59)$$

Die einfachste Art der Feldstärkeermittlung ist das Auftragen von $\frac{4}{3\pi}(\hbar\omega - E_g)^{3/2}$ über der Nummer ν des Extremums in einem Diagramm. Die entstehende Gerade hat den Anstieg

$$S = (\hbar\Theta)^{3/2}. \quad (4.60)$$

Mit Gleichung (4.49) gelangt man zu

$$|F| = \frac{\sqrt{2\mu^*}}{e\hbar}S \quad (4.61)$$

und hat damit einen direkten Zugang zum Betrag der elektrischen Feldstärke in der Probe. Dieser ist umso größer, je weiter die FKO energetisch auseinander liegen. Über das Vorzeichen von F ist aus einer Einzelmessung noch keine Aussage zu treffen. Bei der Messung unter verschiedenen angelegten Gleichspannungen läßt sich die Richtung der Feldstärke allerdings eindeutig aus der $F(U_{dc})$ -Abhängigkeit entnehmen.

4.4 Photoreflexion

4.4.1 Grundlagen

Die Photoreflexion (PR) ist der ER sehr ähnlich. Sie beruht ebenfalls auf der Modulation der internen elektrischen Felder einer Probe. Der Unterschied besteht in der Art der Anregung. Während man bei der ER Kontakte benötigt, um eine Spannung anlegen zu können, benutzt man für die PR stattdessen einen Laser. Die Energie des Lasers muß höher als die Energie der Bandlücke des Materials sein. Das Laserlicht wird daraufhin absorbiert und erzeugt in der Probe Elektron-Loch-Paare. Diese sind in der Lage, die internen elektrischen Felder abzuschirmen, was idealerweise vollständig geschieht. Schaltet man den Laser ab, rekombinieren die überschüssigen Ladungsträger und das ursprüngliche Feld wird wieder aufgebaut. Das PR-Signal ergibt sich dementsprechend aus

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R(0) - R(F)}{\frac{1}{2}[R(0) + R(F)]} = \frac{R_{\text{Laser an}} - R_{\text{Laser aus}}}{R_{\text{mittel}}}. \quad (4.62)$$

Hieraus werden sofort die Nachteile gegenüber der ER deutlich. Es ist nur möglich, Proben zu untersuchen, welche bereits ein eingebautes elektrisches Feld aufweisen. Das elektrische Feld kann nicht beliebig eingestellt werden, sondern lediglich von einem durch die Probe vorgegebenen Startwert auf Null moduliert werden. Es ist ein geeigneter Laser erforderlich, dessen Energie ausreicht, um Ladungsträger in der Probe zu generieren. Der Laser hat nur eine bestimmte Eindringtiefe in die Probe. Es hängt vom Probenaufbau ab, ob Elektronen und Löcher dort erzeugt werden, wo sie auch zur Modulation des elektrischen Feldes beitragen können. Die Rekombination der Ladungsträger kann störende Lumineszenz erzeugen, welche einen großen Untergrund im Meßsignal erzeugt. Der gleiche Effekt wird durch auf den Detektor fallendes Laserlicht hervorgerufen. Wie stark die einzelnen Nachteile die Qualität der Messung beeinflussen, hängt vom verwendeten Laser, dem Materialsystem und dem Schichtaufbau der Proben ab. Demgegenüber hat die PR im Vergleich zur Elektroreflexion einen entscheidenden Vorteil. Sie ist nicht zerstörend und kontaktlos. Es sind keinerlei aufwendige Prozeßschritte nötig, um die Probe mit Schottky- und ohmschen Kontakten zu versehen, welche mit der Meßapparatur verbunden werden müssen. So ist mittels PR eine schnelle und unkomplizierte Messung möglich, welche einer späteren Weiterprozessierung der Probe keinerlei Hindernisse in den Weg stellt.

4.4.2 Experimenteller Aufbau

Der experimentelle Aufbau für die Photoreflexion ähnelt sehr dem in Kapitel 4.3.2 geschilderten für die ER und ist in Abbildung 4.9 dargestellt. Statt des Funktionsgenerators wird

4.4. PHOTOREFLEXION

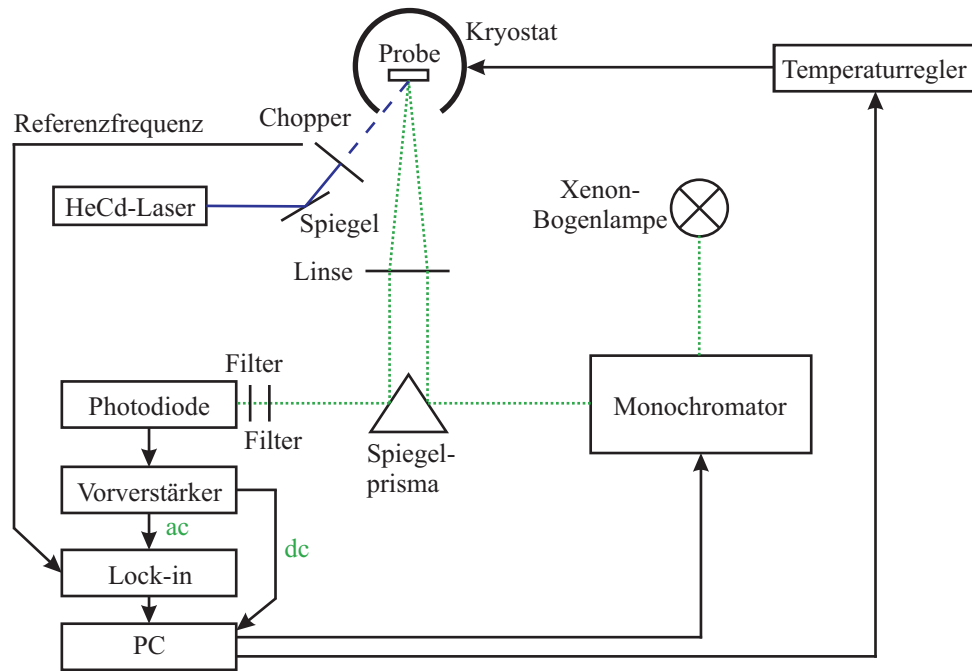


Abbildung 4.9: Schematischer Aufbau des PR-Meßplatzes.

hier ein HeCd-Laser benutzt. Der Laserstrahl wird durch einen Chopper hindurchgeleitet, welcher diesen periodisch unterbricht. Auf diese Art entsteht annähernd eine Rechteckmodulation der Intensität. Anschließend wird der Laserstrahl auf die Probe geleitet. Dabei ist es von entscheidender Bedeutung, daß sich Meßlichtfleck und Laserstrahl genau an der gleichen Stelle auf der Probe befinden, da es nur dort zu einer lokalen Änderung der Reflektivität kommt, wo auch Ladungsträger generiert werden. Vor dem Detektor kann ein optionaler Langpaßfilter platziert werden, welcher verhindert, daß Laserstrahlung auf den Detektor trifft. Ebenso besteht die Möglichkeit mit einem zweiten Filter Lumineszenz aus tiefen Störstellen zu blockieren. Beide Filter tragen dazu bei, den Untergrund im Spektrum zu minimieren, ohne das eigentliche Meßsignal zu beeinträchtigen.

Kapitel 5

Probenstrukturen

5.1 Volumenmaterial

Es wurde eine Serie von *c*-achsenorientierten AlGa_xN-Proben untersucht. Sie wurden an der Technischen Universität Braunschweig hergestellt. Die Abscheidung erfolgte mittels metallorganischer Niederdruckgasphasenepitaxie (MOVPE) in einem Aixtron-AIX 200RF-Horizontalreaktor auf (0001)-Saphirsubstraten. Als Ausgangsstoffe dienten Trimethylindium, -gallium und -aluminium sowie Ammoniak mit Wasserstoff als Trägergas. Detaillierte Erläuterungen zum Wachstum sind in den Referenzen [91, 92] zu finden. Das Wachstum wurde mit einer dünnen (20–30 nm) In_yGa_{1-y}N-Nukleationsschicht begonnen. Der In-Anteil beträgt typischerweise 1–3%. Die Schicht dient der Verspannungsminimierung im darauffolgenden dicken GaN-Puffer. Abgesehen von Probe BS1 wurde abschließend ein

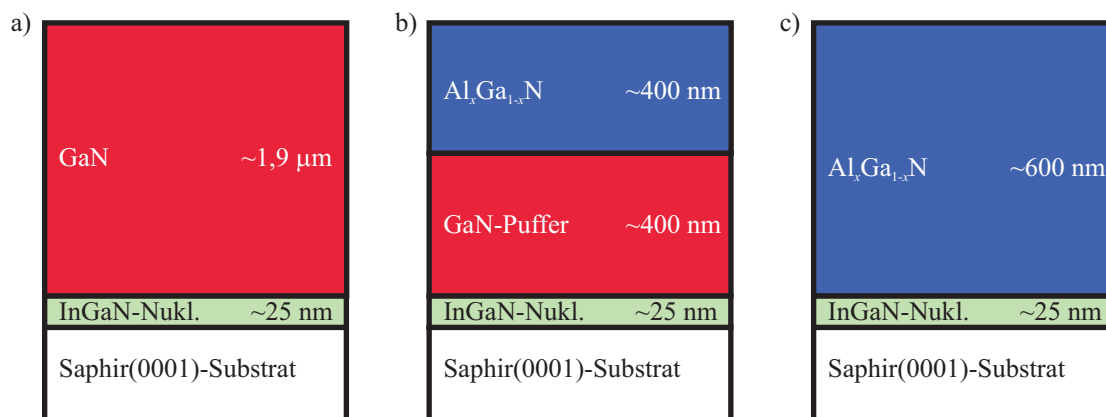


Abbildung 5.1: Probenaufbau der *c*-achsenorientierten Proben a) BS1, b) BS2, BS3, BS5, BS6 und c) BS4.

5.1. VOLUMENMATERIAL

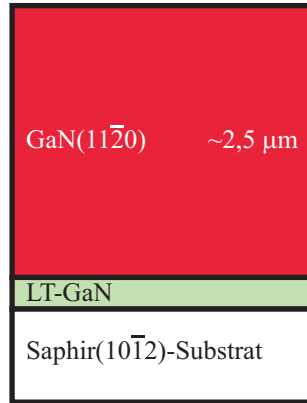
Tabelle 5.1: Al-Gehalte und Schichtdicken der c -achsenorientierten AlGa N -Proben mit Volumenmaterial.

Probe	Al-Gehalt x	GaN-Schichtdicke (nm)	AlGa N -Schichtdicke (nm)
BS1	0,00	1828	-
BS2	0,11	471	394
BS3	0,23	383	365
BS4	0,29	-	595
BS5	0,45	419	398
BS6	0,53	415	720

dicker Al $_x$ Ga $_{1-x}$ N-Film abgeschieden. Bei Probe BS4 wurde das AlGa N unter Verzicht auf den Ga N -Puffer direkt auf der InGa N -Nukleationsschicht abgeschieden. Untersuchungen mittels Rasterkraftmikroskopie (AFM) zeigen eine glatte Oberflächenmorphologie mit einer mittleren Rauigkeit unter 2 nm. Ein Schema der Probenstrukturen zeigt Abbildung 5.1. Die genauen Schichtdicken und Al-Gehalte sind Tabelle 5.1 zu entnehmen.

Als Referenzprobe dient die freistehende Ga N -Probe B1. Diese wurde am Ferdinand-Braun-Institut in Berlin mittels Hydridgasphasenepitaxie (HVPE) auf einem Saphir-Substrat hergestellt. Dieses Verfahren ermöglicht sehr hohe Wachstumsraten zwischen 50 und 150 $\mu\text{m}/\text{h}$. Die entstehenden dicken Schichten können anschließend durch einen Laser vom Substrat abgetrennt werden. Auf diese Art erhält man freistehendes Volumenmaterial, welches in dieser Arbeit als Referenz für unverspanntes Ga N dient. Leider ist diese Probe aufgrund ihrer stark unebenen Oberflächenbeschaffenheit nicht für ellipsometrische Untersuchungen geeignet.

Neben den vorgestellten Proben wurde auch a -achsenorientiertes Volumenmaterial untersucht. Das Ga N stammt von der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg. Mittels MOVPE wurden drei Proben auf einem r -achsenorientierten Saphirsubstrat hergestellt. Nach der Abscheidung einer Ga N -Niedrigtemperaturkeimschicht wurden jeweils 2,5 μm a -achsenorientiertes Ga N gewachsen (siehe Abbildung 5.2). Die drei Proben unterscheiden sich in ihrer Wachstumstemperatur. Die thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Substrat [93] und Ga N -Schicht [94] sind voneinander verschieden und aufgrund der Kristallorientierung anisotrop in der Wachstumsebene. Das Abkühlen nach dem Wachstum auf Raumtemperatur äußert sich daher in verschiedenen anisotropen Spannungszuständen der Proben. Die Gitterkonstanten der Proben in a -, m - und c -Richtung wurden von J. Bläsing mittels hochauflösender Röntgenbeugung bestimmt. Die Daten der Proben sind in Tabelle 5.2 zusammengefaßt.

Abbildung 5.2: Probenaufbau der a -achsenorientierten Proben MD1, MD2 und MD3.Tabelle 5.2: Gitterkonstanten der a -achsenorientierten GaN-Proben.

Probe	Wachstumstemperatur (°C)	a (Å)	m (Å)	c (Å)
MD1	1145	3,1936	2,7560	5,1744
MD2	1105	3,1928	2,7567	5,1760
MD3	1065	3,1922	2,7572	5,1776

Zum Vergleich mit GaN standen zwei a -achsenorientierte AlN-Proben auf r -achsenorientierten Saphirsubstraten zur Verfügung. Bei Probe M1 wurden an der TU München ca. 1100 nm AlN abgeschieden. Rasterkraftmikroskopiemessungen der Hersteller zeigen eine OF-Rauhigkeit von 2,9 nm. Der Nachweis der Orientierung der c -Achse erfolgte mit hochauflösender Röntgenbeugung (TU München) und läßt keinerlei (0001)-orientiertes Material erkennen. Die Herstellung von Probe MD4 erfolgte an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg. Hier wurden etwa 700 nm AlN mittels MOVPE abgeschieden.

5.2 Heterostrukturen

An der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg wurde mittels MOVPE die Probe MD5 als Beispiel für eine einfache AlGaIn/GaN-Heterostruktur gewachsen. Gemäß Abbildung 5.3 wurde auf einem Si(111)-Substrat eine 25 nm dicke AlN-Nukleationsschicht abgeschieden, welche von einem 375 nm dicken Fe-kompensierten GaN-Puffer gefolgt wird. Darüber befindet sich eine bei niedriger Temperatur gewachsene AlN-Zwischenschicht, deren we-

5.2. HETEROSTRUKTUREN

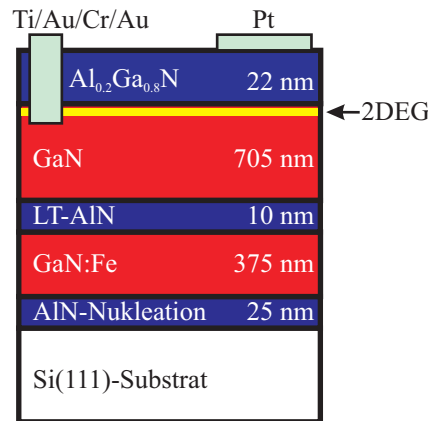


Abbildung 5.3: Probenaufbau von Probe MD5.

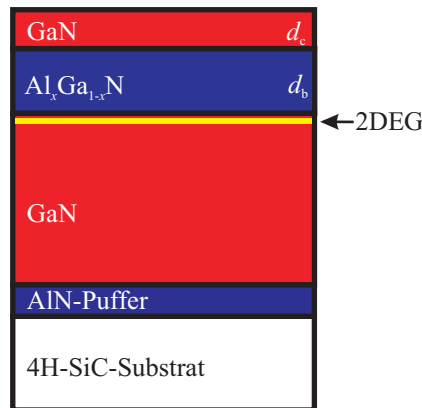


Abbildung 5.4: Probenaufbau der GaN/AlGaIn/GaN-Heterostrukturen mit dünner Deckschicht.

sentliche Aufgabe es ist, für eine Spannungsrelaxation zu sorgen [95,96]. Den Abschluß bildet die eigentliche Heterostruktur in Form einer 705 nm dicken GaN-Schicht und einer $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}$ -Barriere der Dicke $d_b = 22$ nm. Es wurden ohmsche Ti/Au/Cr/Au-Kontakte mit einer Dicke von 30/150/20/250 nm bei 800°C einlegiert. Detaillierte Untersuchungen der Formation ohmscher Kontakte auf n -leitendem GaN finden sich z.B. in [97–103]. Eine Auswahl möglicher Materialien für Schottkykontakte ist z.B. [104,105] zu entnehmen. In diesem Fall dient Pt [106] mit einer Dicke von 10 nm und einem Durchmesser von 680 μm als semitransparenter Schottkykontakt.

Für die Untersuchungen an GaN/AlGaIn/GaN-Heterostrukturen standen 9 Proben mit dünner GaN-Deckschicht zur Verfügung. Sie wurden mittels MOVPE gewachsen und vom Fraunhofer-Institut für Angewandte Festkörperphysik (IAF) Freiburg zur Verfügung

Tabelle 5.3: Schichtdicken, Al-Gehalte und mittels Hallmessungen bestimmte Flächenladungsdichten der GaN/AlGa_N/GaN-Heterostrukturen mit dünner Deckschicht.

Probe	x (%)	d_b (nm)	d_c (nm)	$N_{2\text{DEG,Hall}}$ (10^{12} e/cm^2)
FR1	22,0	24	0	-8,04
FR2	22,9	25	1	-8,13
FR3	25,9	25	1	-9,28
FR4	22,5	22,7	1	-8,47
FR5	19,0	21,2	2,8	-
FR6	22,1	23,4	3	-7,93
FR7	17,5	22	3	-5,58
FR8	7,8	22	3	-1,04
FR9	16,1	26,1	5,4	-

gestellt. Der generelle Aufbau der Proben ist jeweils ähnlich und wird in Abbildung 5.4 ersichtlich. Auf ein 4H-SiC-Substrat wurde zunächst ein 30 (FR2, FR3) bzw. 135 nm (andere Proben) dicker AlN-Puffer mit anschließender dicker GaN-Schicht (FR2, FR3: 1600 nm, andere: 1900 nm) gewachsen. Daraufhin folgt eine etwa 22–25 nm dicke Al_xGa_{1-x}N-Barriere. Bei einem Teil der Proben beträgt der Al-Gehalt ca. 22%, während er bei anderen Proben variiert wurde. Den Abschluß bildet die GaN-Deckschicht. Diese wurde partiell wieder heruntergeätzt, um ihre Dicke zwischen 5,4 nm und 0 nm einzustellen. Die Schichtdicken wurden mittels SE und hochauflösender Röntgenbeugung verifiziert (Daten vom IAF). Die entsprechenden genauen Werte der Proben sind Tabelle 5.3 zu entnehmen. Probe FR1 ist dabei als Referenz ohne Deckschicht zu verstehen. Durch Hall-Messungen am IAF wurden die Flächenladungsträgerdichten der zweidimensionalen Elektronengasse an der unteren AlGa_N/GaN-Grenzfläche bestimmt. Die Resultate sind ebenfalls in Tabelle 5.3 aufgeführt.

Um die Untersuchungen auch auf dickere Deckschichten ausdehnen zu können, wurden drei Proben im Zentrum für Mikro- und Nanotechnologien der TU Ilmenau hergestellt. Entsprechend dem Aufbau in Abbildung 5.5 wurde ein Saphir-Substrat verwendet. Das anschließende Wachstum geschah mittels MOVPE bei einem Totaldruck von 50 mbar und einer Temperatur von 1120°C. Als Ausgangsstoffe dienten Triethylgallium, Trimethylaluminium und Ammoniak mit einem V/III-Verhältnis von 2000. Nach einem Niedrigtemperatur-AlN-Film wurden jeweils 500 nm GaN abgeschieden. Danach folgten die AlGa_N-Barrieren und GaN-Deckschichten. Tabelle 5.4 beinhaltet deren genaue Daten.

5.3. SUPERGITTER

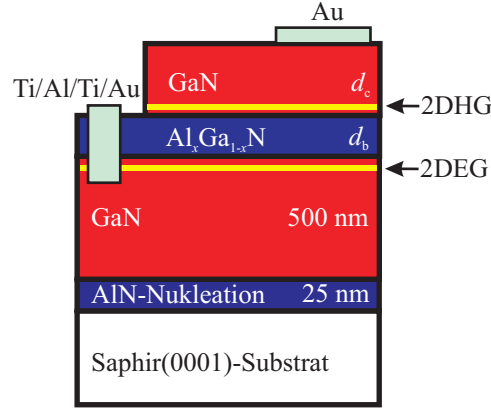


Abbildung 5.5: Probenaufbau der Proben Z1, Z2 und Z3.

Tabelle 5.4: Schichtdicken und Al-Gehalte der GaN/AlGa_N/GaN-Heterostrukturen mit dicker Deckschicht.

Probe	x	d_c (nm)	d_b (nm)
Z1	0,34	40	32,4
Z2	0,31	80	28,5
Z3	0,31	120	29,0

Die Dicke der Deckschicht wurde zwischen 40 und 120 nm variiert. Die Barrierendicke wurde jeweils konstant gehalten, ebenso der Al-Gehalt, der zwischen 31% und 34% beträgt. Hallmessungen bei Raumtemperatur ergaben Flächenladungsdichten von $-7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ und Beweglichkeiten von $700 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Es wurden Mesa geätzt, wobei die obere GaN-Schicht entfernt wurde. Anschließend wurden 20/80/30/100 nm Ti/Al/Ti/Au gesputtert und bei 825°C ausgeheilt, um einen ohmschen Rückkontakt zum 2DEG zu gewährleisten. Mit einem Elektronenstrahl wurden auf die Oberseite der Mesa (mit GaN-Deckschicht) 5 nm dicke semitransparente Au-Schottkykontakte für ER-Messungen aufgedampft.

5.3 Supergitter

An der Technischen Universität Braunschweig wurden drei Multiquantengraben bzw. Supergitter mittels MOVPE gewachsen. Die Abscheidung erfolgte auf einem 6H-SiC-Substrat. Auf die Substrate wurde ein Puffer mit 120 nm AlN und $1,5 \mu\text{m}$ GaN gewachsen. Auf diesen Puffern befinden sich die Supergitter, bestehend aus 20 GaN-Quantengraben, die durch dünne AlN-Barrieren voneinander getrennt sind. Die Grabendicken d_w und

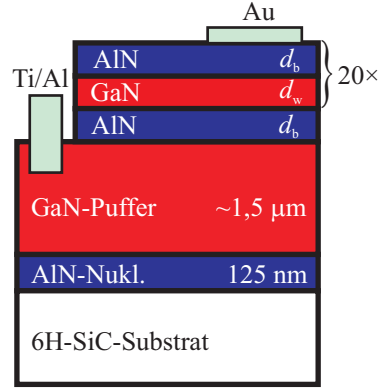


Abbildung 5.6: Probenaufbau der AlN/GaN-Supergitter BS7, BS8 und BS9.

Tabelle 5.5: Barrieren- und Quantengrabbendicken der AlN/GaN-Supergitter.

Probe	d_b (nm)	d_w (nm)
BS7	1,9	2,3
BS8	1,9	1,4
BS9	5,7	1,4

Barrierendicken d_b wurden von Probe zu Probe verändert, um ihren Einfluß auf die optischen Eigenschaften untersuchen zu können. Den schematischen Aufbau der Proben zeigt Abbildung 5.6, während die Schichtdicken Tabelle 5.5 zu entnehmen sind. Alle Schichten sind nominell undotiert. Das AlN hat isolierenden Charakter, für das GaN liegt die (n -)Hintergrunddotierung unterhalb von $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Optische Mikroskopieaufnahmen zeigen größere Risse in den Proben mit einer jeweiligen Entfernung zueinander von etwa 250 μm . Kathodolumineszenzuntersuchungen an vergleichbar strukturierten AlN-Schichten beweisen, daß Verspannungsrelaxation nur in der direkten Umgebung der Risse stattfindet, während 90% der Probenoberfläche voll verspannt sind [107]. Aus diesem Grund sollten die in dieser Arbeit durchgeführten integralen optischen Studien durch den verspannten Anteil dominiert werden.

Um ohmsche Kontakte herzustellen, wurden die Proben an der TU München durch Photolithographie mit anschließendem Ar-Ionenätzen bis in den GaN-Puffer hinein strukturiert. Die Ätztiefen betrugen 160, 125 und 150 nm für die Proben BS7, BS8 und BS9. Eine Beschreibung des Prozesses findet sich in [108]. Eine 30/30 nm dicke Ti/Al-Metallisierung, welche bei 500°C für 5 min getempert wurde, bildet mit Flächen von $500 \times 500 \text{ μm}^2$ die ohmschen Kontakte. Die kreisförmigen, semitransparenten Schottky-

5.3. *SUPERGITTER*

kontakte mit einem Durchmesser von 700 μm wurden durch die Abscheidung von 10 nm Pt gebildet.

Kapitel 6

Experimentelle Ergebnisse - Volumenmaterial

Im letzten Jahrzehnt wurden viele Fortschritte erzielt, Nitridhalbleiter mit verbesserten strukturellen und optischen Eigenschaften herzustellen. Demgegenüber ist das derzeitige Wissen bezüglich ihrer dielektrischen Funktion nur unzureichend. Oftmals wird nur der transparente Spektralbereich betrachtet [46] oder die Ergebnisse beschränken sich auf die ordentliche Komponente der DF [3, 47]. Zudem muß die DF über einen ausgedehnten Spektralbereich bekannt sein, um analytische Modelle zu entwickeln, da die Dispersion von ε_1 bei niedrigen Energien über die Kramers-Kronig-Transformation stark von höher-energetischen kritischen Punkten der Bandstruktur beeinflußt wird [109]. Experimentelle Daten oberhalb von 5 eV sind jedoch sehr rar. Es sind nur pseudodielektrische Funktionen bekannt, da es die schlechte Qualität der Probenoberflächen nicht erlaubte, die Volumen-DF von den Eigenschaften der OF zu entkoppeln [110, 111].

Bei den experimentellen Untersuchungen in diesem Kapitel geht es um die Bestimmung der dielektrischen Funktion von AlGaN-Mischkristallen über einen weiten Spektralbereich und die Entwicklung eines analytischen Modells, mit dessen Hilfe es möglich ist, die DF für eine beliebige Zusammensetzung zu berechnen.

Es wird mit der Untersuchung von *c*-achsenorientiertem Material begonnen. Dieses wird am häufigsten verwendet und seine Wachstumsqualität hat sich in den letzten Jahren deutlich verbessert. Gemäß Gleichung (4.5) verlaufen Lichtstrahlen auch bei flachem Einfallswinkel von 70° nahezu senkrecht in der Probe. Die Messungen sind somit nur sensitiv auf die ordentliche Komponente der DF, während die außerordentliche kaum zum Meßsignal beiträgt. Daher lassen sich in (0001)-Richtung gewachsene Proben näherungsweise mit einem isotropen Modell beschreiben. Auf diese Art soll zunächst die DF der binären Verbindung GaN ermittelt werden. Mit dieser Kenntnis kann zu den ternären

6.1. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON (AL)GAN(0001)

Verbindungen übergegangen werden, deren Puffer ebenfalls aus GaN besteht.

In jüngster Zeit konzentriert man sich verstärkt auch auf Material, dessen optische Achse in der Ebene liegt. Mit einem anisotropen Modell gilt es hier, sowohl die ordentliche als auch die außerordentliche DF zu bestimmen. Die Erfahrungen mit den c -achsenorientierten Proben sind dabei eine wertvolle Hilfe. Sie liefern gute Startparameter für die ordentliche DF und gestatten die sichere Differenzierung zwischen ordentlichem und außerordentlichem Einfluß.

6.1 Dielektrische Funktion von (Al)GaN(0001)

6.1.1 GaN(0001)

Referenzmaterial

Vor den Ellipsometriemessungen soll zunächst das freistehende und somit unverspannte GaN der Referenzprobe B1 untersucht werden, um durch den Vergleich mit dessen Daten auch die anderen Proben vorcharakterisieren zu können.

An der HVPE-Probe wurden temperaturabhängige PL-Messungen durchgeführt. Da tiefe Temperaturen für PL-Experimente besonders geeignet sind, soll zu Beginn das Spektrum bei $T = 5$ K in Abbildung 6.1 diskutiert werden. Das stärkste Signal ist den donatorgebundenen Exzitonen bei 3,4733 und 3,4725 eV zuzuordnen. Die Aufspaltung ist

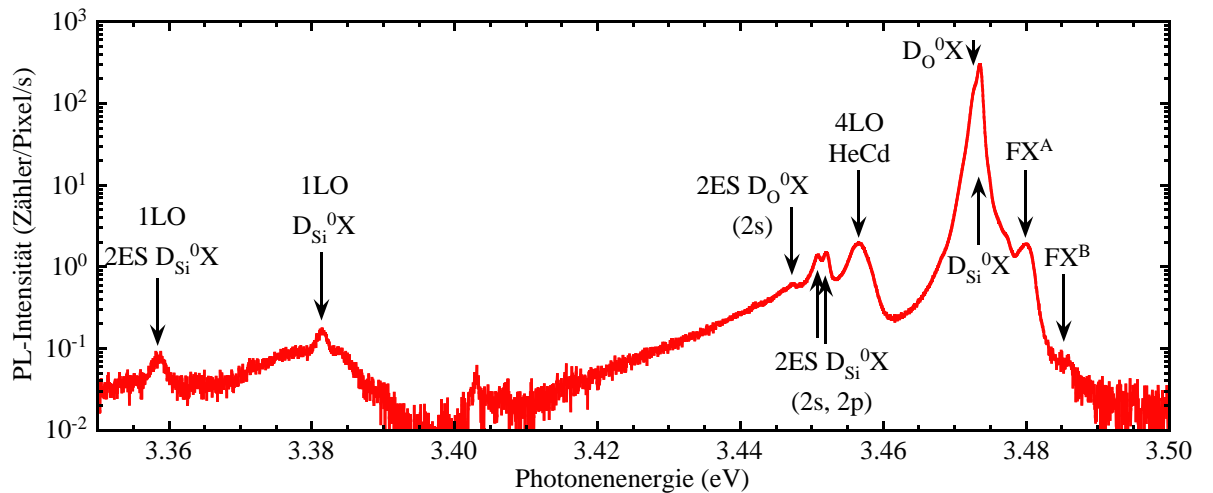


Abbildung 6.1: PL-Spektrum von Probe B1 bei $T = 5$ K. Pfeile kennzeichnen optische Übergänge.

in der Art der Donatoren begründet. Aus dem Abstand zu FX^{A} (3,480 eV) von 6,7 bzw. 7,5 meV läßt sich auf Silizium und Sauerstoff schließen [64]. Die Halbwertsbreite der D^0X -Übergänge ist schmaler als 1 meV, was die hervorragende Kristallinität der Probe unter Beweis stellt. FX^{A} und FX^{B} (3,485 eV) sind bei 5 K nur als hochenergetische Schulter im Spektrum auszumachen.

Im Bereich um 3,45 eV sind sogenannte Zwei-Elektronen-Satelliten (2ES) sichtbar. Diese entstehen, wenn bei der Rekombination des donatorgebundenen Exzitons der Donator in einen angeregten Zustand übergeht. Die Differenz zwischen 2ES und D^0X ergibt sich hierbei aus der Anregungsenergie für den Donator. Das Signal bei 3,457 eV stammt vermutlich von Laserlicht (3,815 eV) unter der Anregung von vier longitudinal-optischen Phononen. Deren Energie beträgt 92 meV in GaN [112].

Die niederenergetischen Signale bei 3,381 und 3,358 eV sind einfachen Phononrepliken der D^0X - und 2ES-Übergänge der Si-Donatoren zuzuordnen. Diese Übergänge finden unter zusätzlicher Aussendung eines longitudinal-optischen Phonons statt und sind so um 92 meV erniedrigt.

Die Lumineszenz tiefer Störstellen ist mindestens fünf Größenordnungen kleiner als die bandkantennahe Lumineszenz und wurde bei dieser Probe im Rahmen der Meßgenauigkeit nicht beobachtet. Die sehr gute Auflösung der gebundenen und freien Exzitonen sowie der Zwei-Elektronen-Satelliten und Phononrepliken spricht für die ausgezeichnete Wachstumsqualität der Probe und unterstreicht die Eignung als Referenzmaterial. Eine ausführliche Diskussion findet sich in [113].

Da die Probe als Maßstab für unverspanntes GaN dienen soll, gilt es nun, die Temperaturabhängigkeit der exzitonischen Übergänge zu betrachten. In Abbildung 6.2 ist der bandkantennahe Bereich von $T = 5$ K bis 295 K dargestellt. Aufgrund der vergleichsweise hohen Exzitonenbindungsenergie von 25 meV sind die Exzitonen über den gesamten Temperaturbereich hinweg zu beobachten. Während bei $T = 5$ K die donatorgebundenen gegenüber den freien Exzitonen dominieren, ändert sich das Verhältnis mit steigender Temperatur, um sich schließlich oberhalb von 100 K umzukehren. Die thermische Energie ist dann groß genug, um die Bindung des Exzitons an den Donator (7 meV) aufzulösen. Die steigende Temperatur führt auch zu einer zunehmenden Intensitätsminderung und thermischen Verbreiterung der Spektren. So sind FX^{A} und FX^{B} oberhalb von 220 K nicht mehr getrennt aufzulösen. Dennoch können die Übergangsenergien durch die Anpassung der Linienform mit Gauß- bzw. Lorentzoszillatoren mit hoher Genauigkeit bestimmt werden. Es findet eine klare Verschiebung zu niedrigeren Energien mit steigender Temperatur statt. Zwischen 5 und 295 K beträgt sie ca. 65 meV. Die Ergebnisse werden später in Abbildung 6.5 zusammengefaßt und in dieser Arbeit als Referenz für unverspanntes GaN

6.1. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON (AL)GAN(0001)

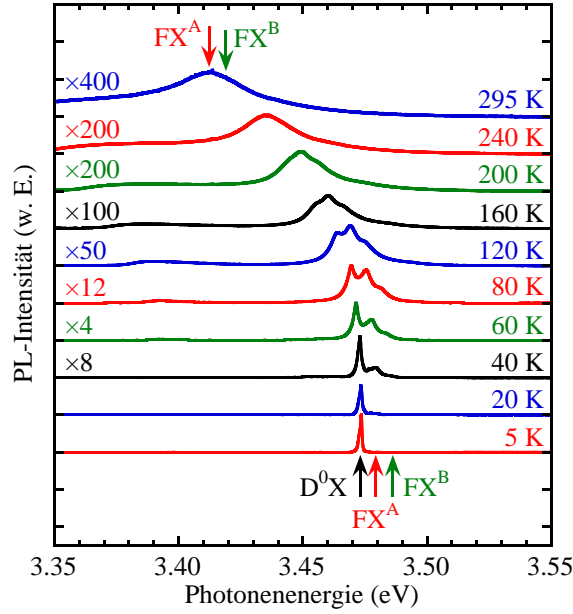


Abbildung 6.2: Temperaturabhängige PL-Spektren von Probe B1. Optische Übergänge mit Pfeilen gekennzeichnet. Zahlen geben Temperatur (rechts) und eventuelle Normierungsfaktoren (links) an.

verwendet.

GaN auf Saphirsubstrat

Die GaN-Probe BS1 auf Saphirsubstrat wurde ebenfalls mittels PL vorcharakterisiert. Dies ermöglicht einerseits eine genauere Bestimmung der exzitonen Übergangsenergien und andererseits Aussagen über die optische Qualität der Probe.

Abbildung 6.3 zeigt das PL-Gesamtspektrum der GaN-Probe bei $T = 5$ K. Das Spektrum hat eine dominante Spitze bei 3,481 eV, welche D^0X zugeordnet werden kann. Die Halbwertsbreite dieses Signals ist kleiner als 3 meV, was für eine gute Qualität der Probe spricht. Genau 92 meV unterhalb ist eine Phononreplik sichtbar. Diese wird durch die Rekombination eines donatorgebundenen Exzitons unter Aussendung eines Phonons erzeugt. Im niederenergetischen Teil des Spektrums ist eine breite Lumineszenzbande zu erkennen, welche von tiefen Störstellen herrührt. Wegen ihrer Farbe spricht man auch von der sogenannten gelben Lumineszenz. Zu beachten ist, daß die Intensität der Störstellenlumineszenz gegenüber dem bandkantennahen Signal um zwei Größenordnungen geringer ist. Auch dies unterstreicht die Wachstumsqualität des Materials.

Durch temperaturabhängige Messungen im bandkantennahen Bereich gelangt man zu

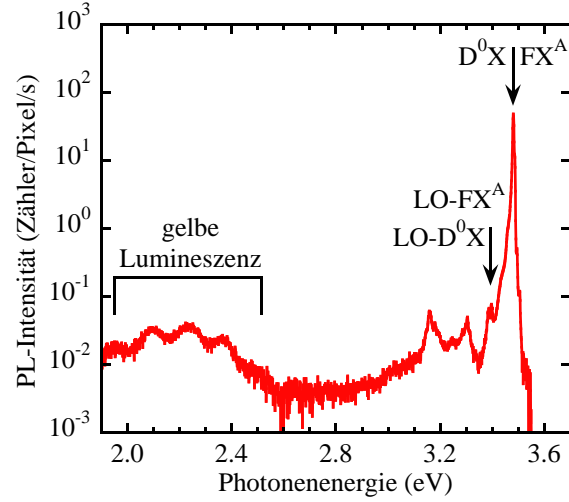
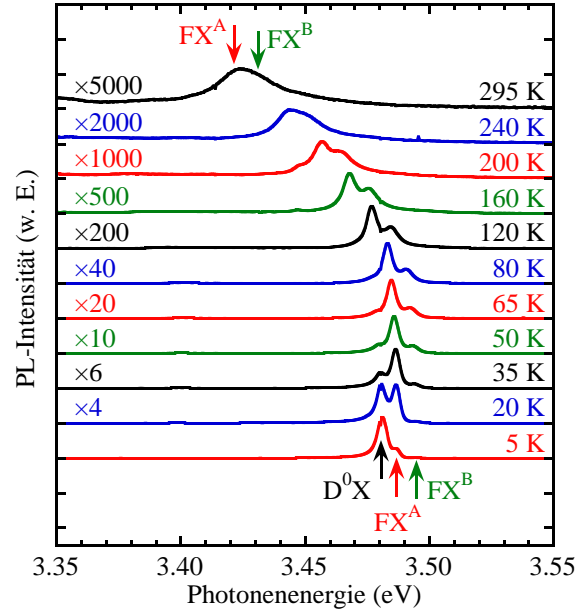

 Abbildung 6.3: PL-Spektrum von Probe BS1 bei $T = 5$ K.


Abbildung 6.4: Temperaturabhängige PL-Spektren von Probe BS1. Optische Übergänge mit Pfeilen gekennzeichnet. Zahlen geben Temperatur (rechts) und eventuelle Normierungsfaktoren (links) an.

den Spektren in Abbildung 6.4. Das Verhalten ist ähnlich wie bei der HVPE-Probe. Bei tiefen Temperaturen dominiert D^0X , während bei Erwärmung FX^A und FX^B gegenüber D^0X an Intensität gewinnen. Auch hier bewirkt die Erhöhung der Temperatur eine Rotverschiebung der Übergänge, einhergehend mit einer zunehmenden Verbreiterung. Die

6.1. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON (AL)GAN(0001)

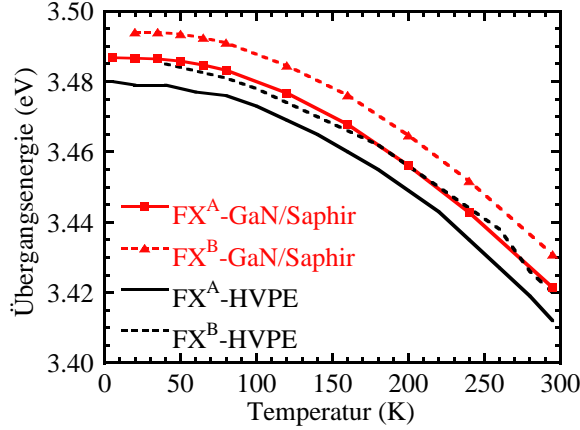


Abbildung 6.5: Temperaturabhängigkeit der Übergangsenergien von FX^{A} und FX^{B} von GaN/Saphir verglichen mit freistehendem GaN.

Übergangsenergien können erneut durch eine Linienformanpassung mit Gauß- bzw. Lorentzoszillatoren gewonnen werden. Abbildung 6.5 zeigt eine graphische Darstellung der Temperaturabhängigkeit zum Vergleich mit dem freistehenden GaN der HVPE-Probe. Es ist zu erkennen, daß GaN auf Saphir die gleiche Abhängigkeit zeigt wie unverspanntes GaN. Die Energien von A- und B-Exziton sind nur um ca. 7 meV zueinander verschoben. Diese Verschiebung ist gleichbedeutend mit einer kompressiven Verspannung bei der Abscheidung auf einem Saphirsubstrat. Setzt man Gleichung (2.33) in die Gleichungen (2.34) und (2.35) ein und benutzt die Parameter aus den Tabellen 2.1 und 2.2, dann erhält man für die Verschiebung des A-Übergangs

$$\Delta E^{\text{A}} = -8,1809 \text{ eV} \cdot \epsilon_{xx} \quad (6.1)$$

und kann so aus der Energieverschiebung die Verspannung in der Wachstumsebene berechnen. Für die untersuchte GaN/Saphir-Probe beträgt diese $\epsilon_{xx} = 8,56 \times 10^{-4}$. Die Verspannung kann im Rahmen der Meßgenauigkeit über den gesamten untersuchten Temperaturbereich hinweg als nahezu konstant angesehen werden.

Nach diesen Voruntersuchungen folgen nun die Ausführungen zu den ellipsometrischen Messungen. In Abbildung 6.6 sind die Parameter Ψ und Δ , gewonnen aus Labor- und Bessydaten, für Probe BS1 mit schwarzen gepunkteten Linien dargestellt. Unterhalb von 3,4 eV zeigen die Spektren Oszillationen. In diesem Spektralbereich sind die Proben transparent und es kommt insbesondere in der dickeren GaN-Schicht zur Ausbildung von Interferenzerscheinungen. Aufgrund des hohen Absorptionskoeffizienten von $\sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$

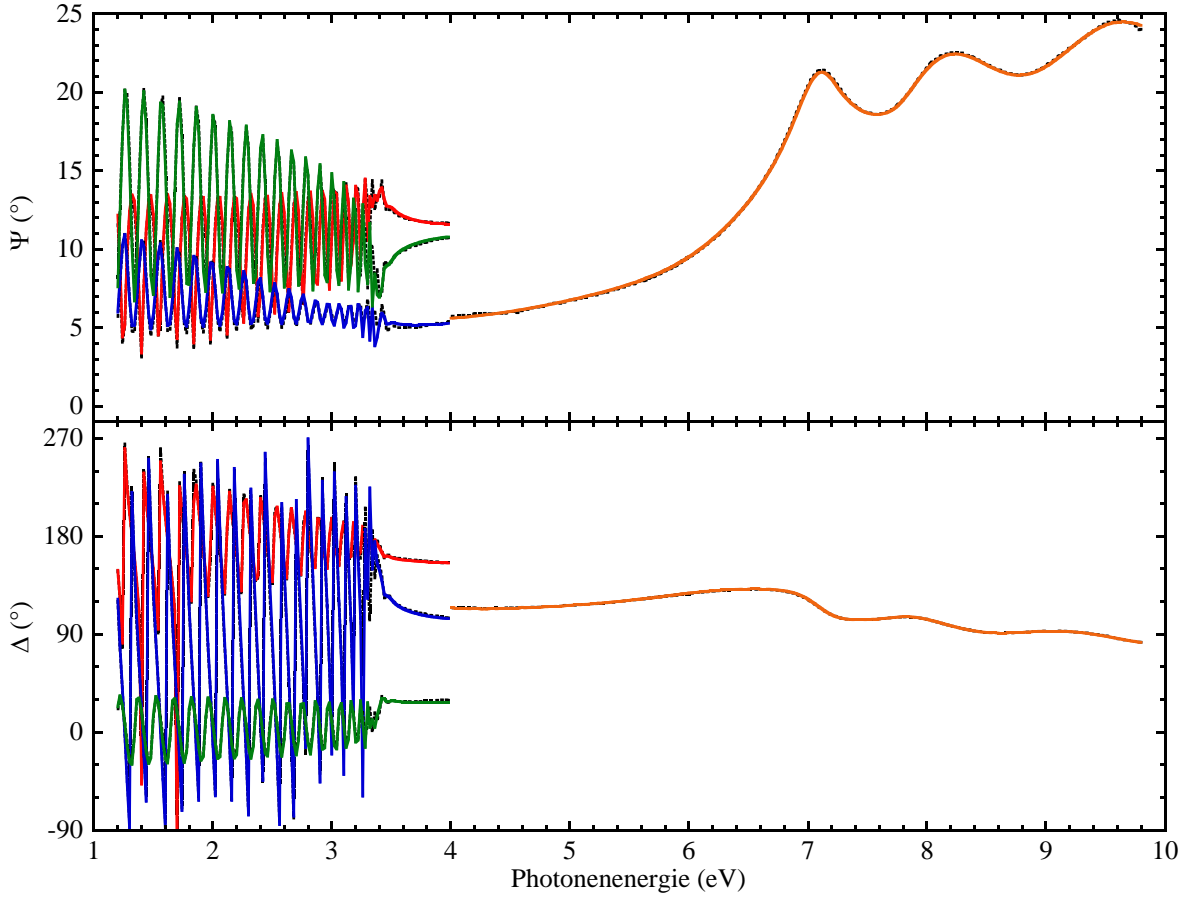


Abbildung 6.6: Ellipsometrische Parameter Ψ und Δ von Probe BS1 unter verschiedenen Einfallswinkeln. Experiment – schwarz gepunktet, Modellanpassung unter Einfallswinkel von 62° (rot), 68° (blau), 74° (grün) und $67,4^\circ$ (orange) – durchgezogen.

ist dies oberhalb der Bandlücke nicht mehr möglich. Die Eindringtiefe des Lichtes ist dort deutlich geringer als die doppelte Schichtdicke und das GaN wirkt somit ähnlich einem halbunendlichen Medium. Die Spektren wurden mittels eines Modells angepaßt, welches in der Lage ist, alle Kurven gleichzeitig zu beschreiben. Es besteht aus dem Substrat, der Nukleationsschicht von 40 nm inklusive einer Grenzflächenrauhigkeit an Ober- und Unterseite, einer 1828 nm-dicken GaN-Schicht und einer Oberflächenrauhigkeit von 2,0 nm. Die Anpassung der Schichtdicken im Modell sowie der DF der GaN- und der InGaN-Nukleationsschicht führt zu den durchgezogenen Linien in Abbildung 6.6. Für alle Winkel zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Die Interpretation des Verlaufes von Ψ und Δ ist oft schwierig. Häufig wird deshalb die Pseudo-DF $\langle \hat{\epsilon} \rangle$

6.1. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON (AL)GAN(0001)

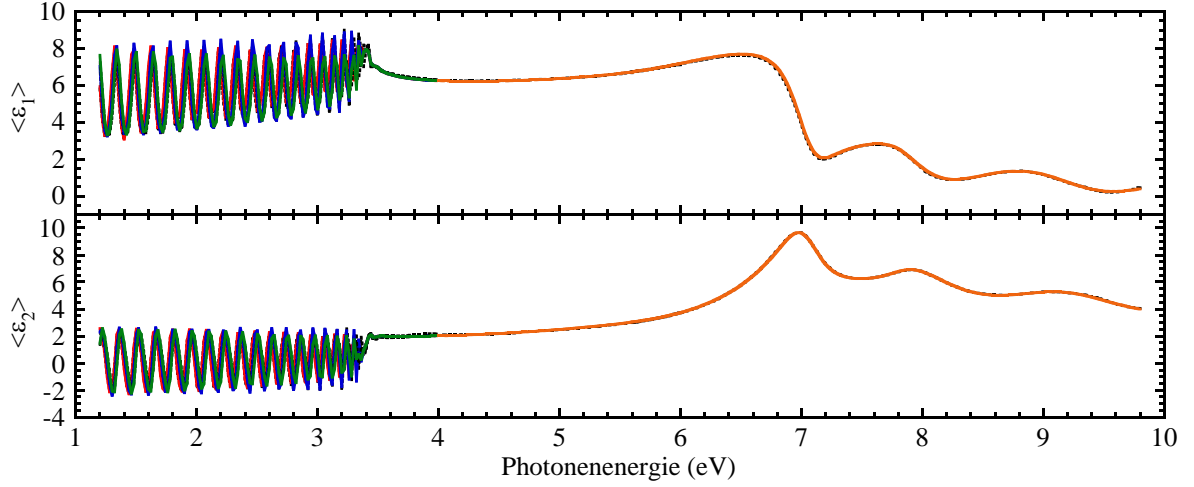


Abbildung 6.7: Real- und Imaginärteil der pseudodielektrischen Funktion von Probe BS1. Experiment – schwarz gepunktet, Modellanpassung unter Einfallswinkel von 62° (rot), 68° (blau), 74° (grün) und $67,4^\circ$ (orange) – durchgezogen.

dargestellt. Dies ist die scheinbare DF einer Probe, wenn man annimmt, diese würde nur aus einer einzigen halbumendlichen Schicht bestehen. Dabei werden Materialeigenschaften und Eigenschaften der Probe wie Rauigkeit und Schichtdicken miteinander vermischt. Die Pseudo-DF wird aus Ψ , Δ und dem Einfallswinkel berechnet:

$$\langle \varepsilon_1 \rangle = \frac{\sin^2 \theta_0 \left(1 + \tan^2 \theta_0 \left(\frac{1}{\tan \Psi} - \tan \Psi \right)^2 - 4(1 - \cos^2 \Delta) \right)}{\left(\frac{1}{\tan \Psi} + \tan \Psi + 2 \cos \Delta \right)^2}, \quad (6.2)$$

$$\langle \varepsilon_2 \rangle = \frac{4 \sin^2 \theta_0 \tan^2 \theta_0 \left(\frac{1}{\tan \Psi} - \tan \Psi \right) (1 - \cos^2 \Delta)}{\left(\frac{1}{\tan \Psi} + \tan \Psi + 2 \cos \Delta \right)^2} \cdot \frac{\sqrt{|1 - \cos^2 \Delta|}}{|1 - \cos^2 \Delta|}. \quad (6.3)$$

Sie ist in Abbildung 6.7 zu sehen. Im transparenten Spektralbereich sind auch hier Interferenzerscheinungen zu beobachten. Da sich mit dem Einfallswinkel die Phasendicke δ ändert, verschieben sich die Minima und Maxima mit θ_0 . Im Gegensatz zu ε_2 kann $\langle \varepsilon_2 \rangle$ bemerkenswerter Weise auch negative Werte annehmen. Sobald die Probe das eindringende Licht vollständig absorbiert ($\hbar\omega > 3,5$ eV), verschwinden die Oszillationen und die Pseudo-DF wird winkelunabhängig. Insbesondere ist zu beachten, wie gut die Labordaten und die Daten des BESSY-Ellipsometers bei 4,0 eV aneinander anschließen. Im hochenergetischen Bereich ähnelt die Pseudo-DF sehr stark der wirklichen DF von GaN. Die Höhe von $\langle \varepsilon_1 \rangle$ und $\langle \varepsilon_2 \rangle$ ist dabei allerdings signifikant von der OF-Rauigkeit der Probe beeinflusst. Auch in diesem Spektralbereich ist also streng zwischen der reinen

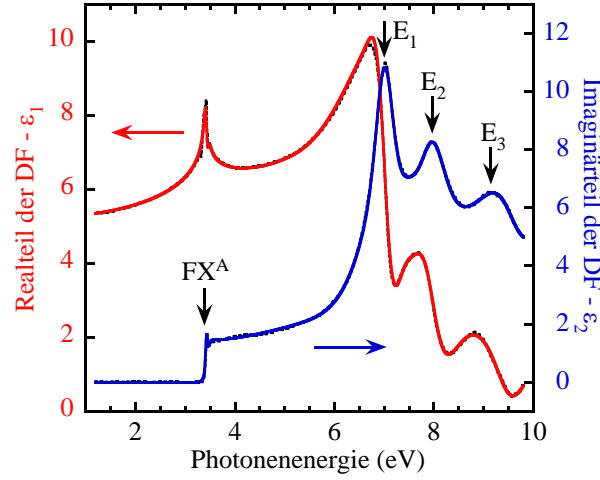


Abbildung 6.8: Real- und Imaginärteil der dielektrischen Funktion von GaN(0001). Punkt-für-Punkt-Anpassung schwarz gepunktet, parametrisches Modell farbig durchgezogen.

Materialgröße $\hat{\epsilon}$ und der Pseudo-DF zu unterscheiden. In Abbildung 6.7 wird ebenso wie in Abbildung 6.6 die Übereinstimmung zwischen den experimentellen Daten (schwarze Punkte) und den auf der Basis eines Schichtmodells generierten Daten (farbige Linien) deutlich.

Aufgrund der Qualität der Anpassung kann davon ausgegangen werden, daß das Modell die Eigenschaften der Probe hinreichend gut wiedergibt. Man ist nun in der Lage die DF von GaN aus dem Modell zu entnehmen. Sie ist in Abbildung 6.8 abgebildet. Die durchgezogene Linie wurde aus einer parametrischen Modellierung [114] der DF gewonnen, wie sie bereits für verschiedene Materialsysteme Anwendung fand [115–118]. Zum Vergleich zeigt die gepunktete Kurve eine Punkt-für-Punkt-Anpassung, wobei ϵ_1 und ϵ_2 für jeden Energiewert völlig unabhängig vom Rest des Spektrums angepaßt wurden. Die Kurven sind über den gesamten Spektralbereich nahezu deckungsgleich. Auch zeigt die Punkt-für-Kurve unterhalb der Bandlücke einen völlig glatten Verlauf. Hier sind keinerlei verbleibende Interferenzoszillationen mehr sichtbar. Diese Fakten beweisen die Qualität des Schichtmodells inklusive der darin enthaltenen dielektrischen Funktionen.

Betrachtet man ϵ_2 , so sieht man eine scharfe Absorptionskante bei 3,42 eV. Die auftretende Spitze zeigt den exzitonischen Charakter und erlaubt die Zuordnung zum freien A-Exziton. Die Ellipsometrie liefert somit die gleiche Übergangsenergie wie sie schon aus dem hiervon unabhängigen PL-Experiment (3,421 eV) bestimmt wurde.

Im hochenergetischen Bereich sind drei Oszillatoren mit vergleichsweise hoher Ampli-

6.1. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON (AL)GAN(0001)

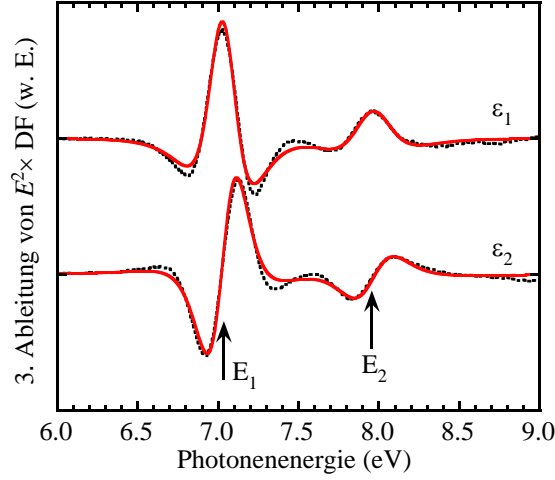


Abbildung 6.9: Dritte Ableitung der mit der quadrierten Photonenenergie multiplizierten DF von GaN(0001) (gepunktet), Linienformanpassung nach Gleichung (6.4) (durchgezogen). CPBS durch Pfeile gekennzeichnet.

tude zu finden. Sie werden in der Regel als E_1 , E_2 und E_3 bezeichnet und stammen von höherenergetischen kritischen Punkten in der Bandstruktur des Materials. Durch die hohe Oszillatorstärke sind sie auch im transparenten Spektralbereich wesentlich für die Höhe von ϵ_1 und damit des Brechungsindex verantwortlich (vergleiche Gleichung (2.43)). Somit ist ihre möglichst genaue Beschreibung von grundlegender Bedeutung. Aufgrund der Breite der Übergänge fällt es schwer, ihre Energie mit Exaktheit zu bestimmen. Man kann die Genauigkeit jedoch erhöhen, indem man die Punkt-für-Punkt-DF mit dem Quadrat der Photonenenergie multipliziert, anschließend die dritte Ableitung bildet und diese dann versucht, analog zu den ER-Spektren mit Gleichung (4.44) zu beschreiben [82]:

$$\frac{d^3}{d(\hbar\omega)^3} (\hbar^2 \omega^2 \cdot \hat{\epsilon}) = \sum_j \frac{C_j e^{i\phi_j}}{(\hbar\omega - E_j + i\Gamma_j)^{m_j/2}}. \quad (6.4)$$

Auf diese Art wird der Untergrund eliminiert und die einzelnen Übergänge sind deutlich getrennt zu erkennen. Das Ergebnis der Linienformanpassung für die Punkt-für-Punkt-DF ist in Abbildung 6.9 zu sehen. Im dargestellten Energiebereich gelingt die Anpassung mit zwei Oszillatoren. Erwartungsgemäß unterscheiden sich die Kurven für ϵ_1 und ϵ_2 lediglich um 90° in ihrer Phase. Die ermittelten Energiepositionen sind 7,00 eV für den E_1 - und 7,96 eV für den E_2 -Übergang. Der E_3 -Übergang ist auf diese Art nicht zu identifizieren. Aufgrund der geringeren Intensität des Lichtes am oberen Ende des Meßbereiches ist hier das Signal-Rausch-Verhältnis schlechter. Durch die Multiplikation mit $(\hbar\omega)^2$ wird dies noch verstärkt, so daß die Anpassung der dritten Ableitung kein eindeutiges Ergebnis

liefert. Für diesen Übergang wird die Energie mit 9,25 eV direkt Abbildung 6.8 bzw. dem ellipsometrischen Modell entnommen.

6.1.2 AlGaN(0001)

Mit der Kenntnis der DF von GaN ist es nun möglich, auch die AlGaN-Proben mit darunterliegendem GaN-Puffer zu untersuchen. Auch hier soll zunächst mit vergleichenden PL- und PR-Studien begonnen werden, um die hohe optische Qualität der Filme zu demonstrieren. PL-Messungen sind nur für die Probe mit einem Al-Anteil von 11% möglich, da für die anderen Proben die Bandlücke bereits oberhalb der Energie des Anregungslasers liegt und somit keine Elektron-Loch-Paare im AlGaN erzeugt werden können. Das Ergebnis für Probe BS2 ist in Abbildung 6.10 dargestellt. Unterhalb von 3,5 eV wird die Emission des GaN-Puffers detektiert. Das Signal ist vergleichsweise gering, da der Laser bereits in der dicken AlGaN-Schicht absorbiert wird und kaum bis zum GaN hindurchdringt. So erreichen nur wenige Elektron-Loch-Paare durch Diffusion den GaN-Puffer, um dort zu rekombinieren. Der dominante Teil des Spektrums stammt vom energetisch höherliegenden AlGaN-Signal. Die Übergangsenergie beträgt 3,637 eV bei Raumtemperatur. Das Spektrum bei $T = 80$ K ist demgegenüber um ca. 55 meV zu höheren Energien verschoben. Die Intensität ist um den Faktor 4 höher und die Halbwertsbreiten der Emissionslinien sind schmaler, was die Bestimmung der Übergangsenergien erleichtert. In Abbildung 6.11

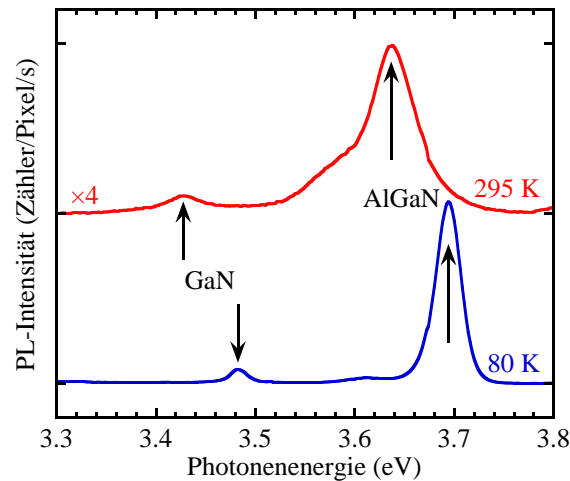


Abbildung 6.10: Temperaturabhängige PL-Spektren von Probe BS2. Übergangsenergien von GaN und $\text{Al}_{0,11}\text{Ga}_{0,89}\text{N}$ mit Pfeilen gekennzeichnet. Zahlen geben Normierungsfaktoren (links) und Temperatur (rechts) an.

6.1. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON (AL)GAN(0001)

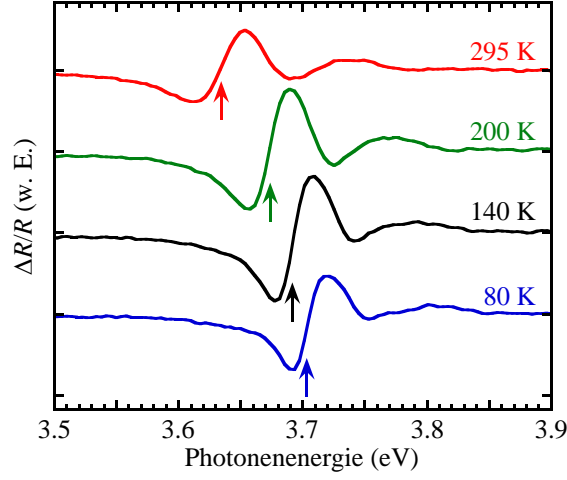


Abbildung 6.11: Temperaturabhängige PR-Spektren von Probe BS2. $\text{Al}_{0,11}\text{Ga}_{0,89}\text{N}$ -Übergangsenergien mit Pfeilen gekennzeichnet.

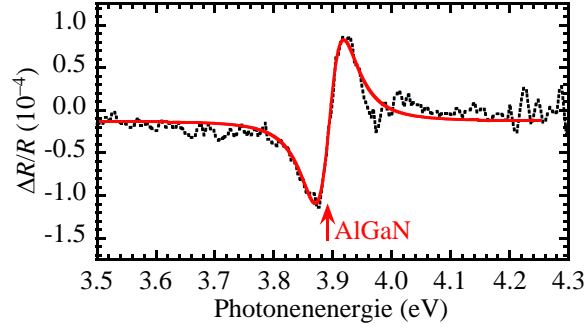


Abbildung 6.12: PR-Spektrum von Probe BS3 bei Raumtemperatur. Experimentelle Daten (schwarz gestrichelt) und Linienformanpassung (rot durchgezogen). $\text{Al}_{0,23}\text{Ga}_{0,77}\text{N}$ -Übergangsenergie mit Pfeil gekennzeichnet.

sind vergleichende PR-Messungen gezeigt. Da das GaN-Signal aus ähnlichen Gründen, wie sie oben beschrieben wurden, kaum zu beobachten ist, wird sich auf den Spektralbereich des AlGa_N beschränkt. Auch hier ist die Energieverschiebung der Spektren mit fallender Temperatur ersichtlich. Oberhalb der Bandkante (mit Pfeilen gekennzeichnet) ist eine Franz-Keldysh-Oszillation zu erkennen. Diese ist auf die Oberflächenbandverbiegung zurückzuführen und soll nicht weiter diskutiert werden. Eine Linienformanalyse gemäß Gleichung (4.44) ermöglicht die Bestimmung der temperaturabhängigen Bandlücke des Materials. Trotz der Breite der PR-Signale liegt die Übereinstimmung mit der PL innerhalb von 5 meV.

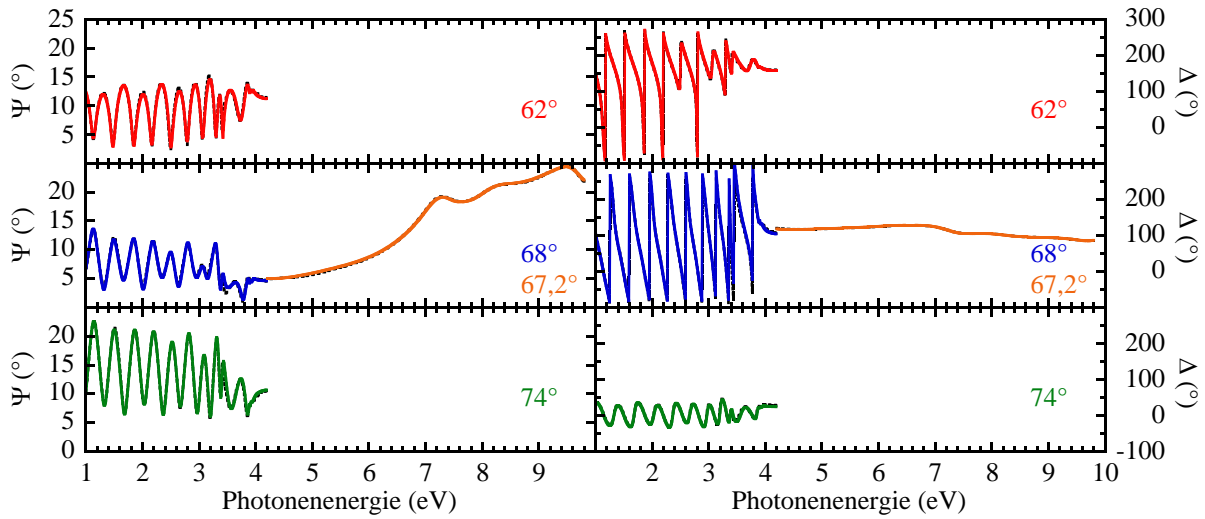


Abbildung 6.13: Ellipsometrische Parameter Ψ (links) und Δ (rechts) für Probe BS3 unter verschiedenen Einfallswinkeln. Experimentelle Daten (schwarz gepunktet) und Modell (farbig durchgezogen).

Obwohl für Probe BS3 die AlGaIn-Bandlücke bereits knapp oberhalb der Laserenergie liegt, ist auch hier eine PR-Messung bei Raumtemperatur möglich (siehe Abbildung 6.12). Trotz des vergleichsweise schwachen Signals wurde eine Anpassung nach Gleichung (4.44) vorgenommen, welche ebenfalls im Diagramm eingezeichnet ist. Dabei wurde die FKO bei 4,0 eV außer Acht gelassen. Die ermittelte Übergangsenergie beträgt 3,894 eV. Niedrigere Temperaturen erhöhen die Übergangsenergie, wodurch das Signal aufgrund der größer werdenden Differenz zur Laserenergie verschwindet.

Für die anderen Proben mit höherem Al-Anteil sind Studien der AlGaIn-Schicht mit einem HeCd-Laser als Anregungsquelle ausgeschlossen. Daher sollen die Untersuchungen nun mit den Ellipsometriemessungen fortgesetzt werden. Das prinzipielle Vorgehen ist dabei stets ähnlich zu Probe BS1. Deshalb werden hier nur exemplarisch die Meßdaten von Probe BS3 mit der zugehörigen Modellanpassung gezeigt (siehe Abbildung 6.13). Die Daten des Laborellipsometers wurden bei drei Einfallswinkeln (62° , 68° und 74°) aufgenommen, BESSY-Messungen existieren nur für $67,2^\circ$. Das Modell zur Beschreibung der Probe basiert auf einem Saphirsubstrat mit InGaIn-Nukleationsschicht. Danach folgen nach einer Zwischenschicht ca. 410 nm GaIn und anschließend die eigentliche 370 nm dicke $\text{Al}_{0,23}\text{Ga}_{0,77}\text{In}$ -Schicht unter Berücksichtigung der GF-Rauhigkeit. Den Abschluß bildet eine OF-Rauhigkeit von 1,6 nm. Aus der Abbildung wird ersichtlich, daß die optischen Eigenschaften der Probe sehr gut durch das Modell reproduziert werden.

6.1. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON (AL)GAN(0001)

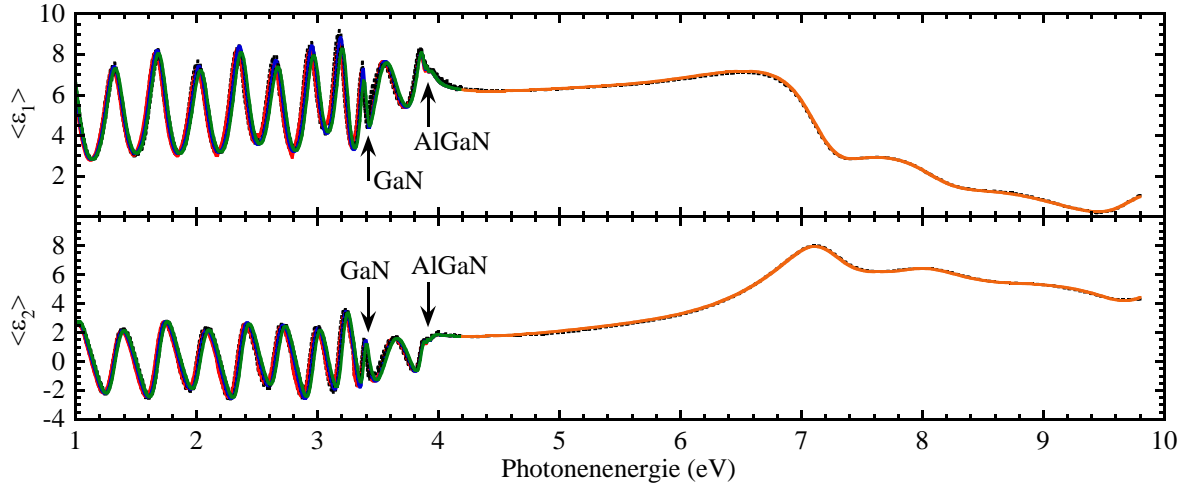


Abbildung 6.14: Real- und Imaginärteil der pseudodielektrischen Funktion für Probe BS3. Experimentelle Daten (schwarz gepunktet) und Modell (farbig durchgezogen). Bandlücke von GaN und AlGaN mit Pfeilen gekennzeichnet.

Wegen der höheren Anschaulichkeit der Pseudo-DF gegenüber Ψ und Δ , ist diese in Abbildung 6.14 dargestellt. Im niederenergetischen Teil sind Schichtdickeninterferenzen zu beobachten. Periode und Einhüllende ergeben sich zum einen aus Interferenzen im GaN-Puffer und zum anderen aus Vielfachreflexion in der AlGaN-Schicht. Die unterschiedlichen Brechungsindizes und Dicken der beiden Schichten verursachen eine Überlagerung von Oszillationen mit leicht verschiedenen Perioden. Oberhalb der GaN-Bandlücke ($\sim 3,45$ eV) wird das in die GaN-Schicht eindringende Licht absorbiert und die Vielfachreflexion findet nur noch im AlGaN statt. In den Spektren ist klar erkennbar, wie sich das Verhalten der Oszillationen in diesem Bereich ändert. Oberhalb der AlGaN-Bandlücke bei 3,9 eV verschwinden die Interferenzen vollständig. Ab hier wirkt die AlGaN-Schicht näherungsweise wie ein halbunendliches Medium. Im hochenergetischen Bereich sieht man bereits analog zum GaN die drei Übergänge E_1 , E_2 und E_3 . Sie sind in ihrer Amplitude geschwächt, da bei diesen kurzen Wellenlängen die Oberflächenrauigkeit einen entscheidenden Einfluß auf die optische Antwort der Probe hat. Die anderen AlGaN-Proben zeigen ein ähnliches Verhalten mit der Ausnahme von Probe BS4, für die der GaN-Puffer entfällt.

Aus den entwickelten Schichtmodellen für die einzelnen Proben läßt sich nun die DF von AlGaN in Abhängigkeit vom Al-Anteil entnehmen. Die Real- und Imaginärteile sind in Abbildung 6.15 gegenübergestellt. Die gezeigten Kurven haben einen glatten Verlauf und enthalten keinerlei zurückbleibende Interferenzoszillationen, was die Voraussetzung

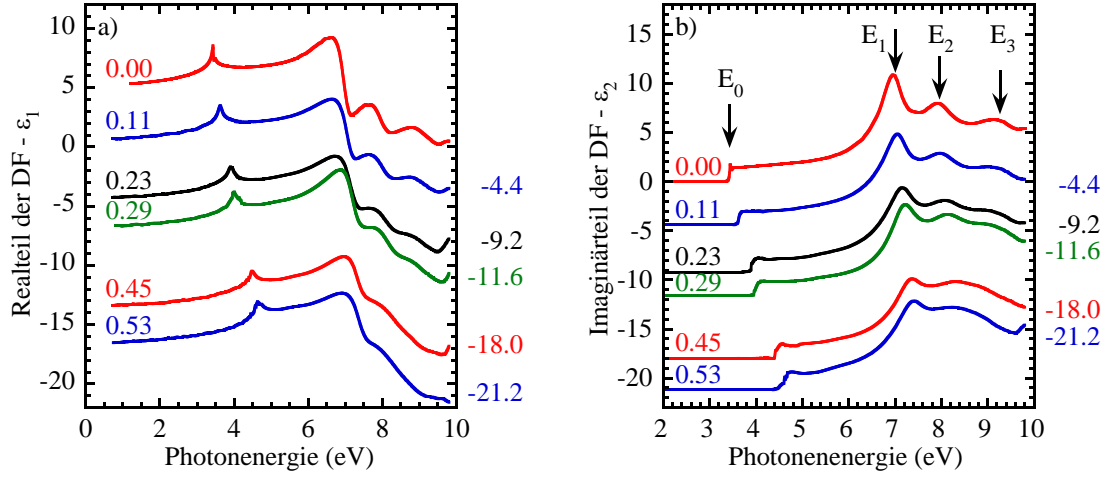


Abbildung 6.15: a) Real- und b) Imaginärteil der DF von $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ in Abhängigkeit vom Al-Gehalt x . Kurven sind proportional zu x , gemäß den rechts angegebenen Werten vertikal verschoben. Kritische Punkte der Bandstruktur mit Pfeilen gekennzeichnet.

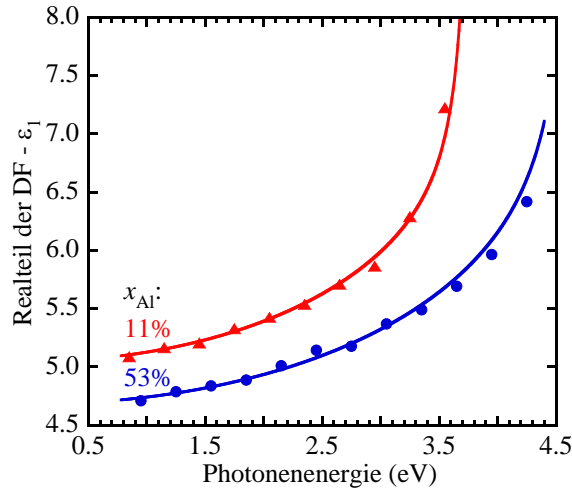


Abbildung 6.16: Aus Ellipsometrie bestimmter Realteil der DF (Symbole) für Proben BS2 und BS6, verglichen mit Sellmeier-Dispersionsmodell aus Referenz [119] (Linien).

für die Anwendbarkeit der verwendeten Modelle ist. Die Gültigkeit wird unterstützt durch den Vergleich mit Ergebnissen, welche durch Prismenkopplungstechnik erzielt wurden [119]. In Abbildung 6.16 lässt sich über den gesamten transparenten Energiebereich eine exzellente Übereinstimmung zwischen den SE-Untersuchungen (Symbole) und den

6.1. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON (AL)GAN(0001)

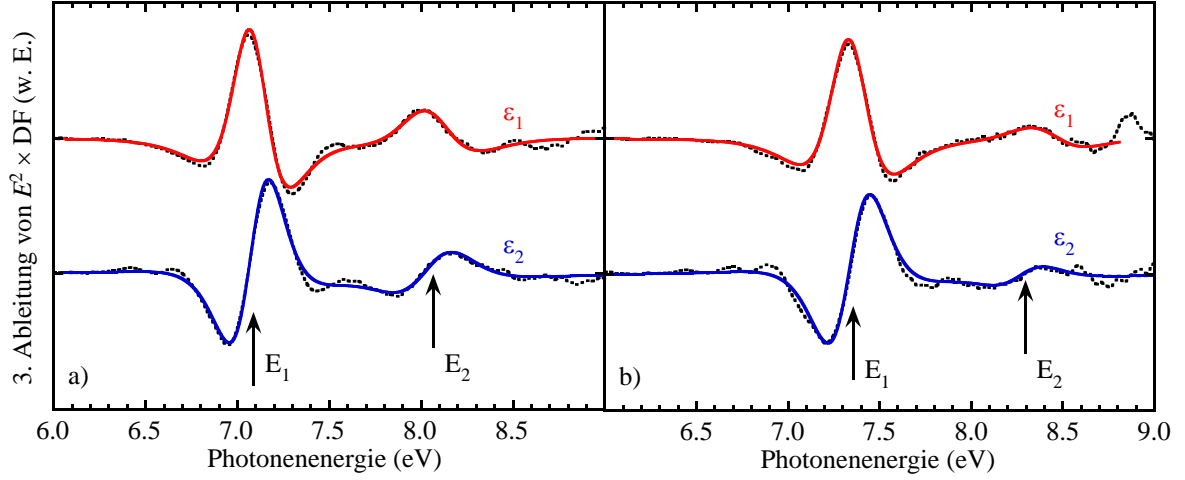


Abbildung 6.17: Dritte Ableitung der mit der quadrierten Photonenenergie multiplizierten DF von a) Probe BS2 und b) Probe BS5 (schwarz gepunktet), Linienformanpassung nach Gleichung (6.4) (farbig durchgezogen). CPBS durch Pfeile gekennzeichnet.

Dispersionskurven gemäß der Sellmeier-Gleichung

$$\varepsilon_1(\lambda) = 1 + \frac{A_1^* \lambda^2}{\lambda^2 - (B_1^*)^2} + \frac{A_2^* \lambda^2}{\lambda^2 - (B_2^*)^2} \quad (6.5)$$

mit den Parametern aus Referenz [119] (Linien) finden.

Schaut man sich in Abbildung 6.15 das Signal der Bandkante an, so ist es für das untersuchte AlGaIn nur wenig breiter als bei GaN, was auf die gute Homogenität der Mischkristallzusammensetzung hindeutet. Mit steigendem Al-Gehalt verschiebt sich die Bandlücke zu höheren Energien. In der Abbildung offenbart sich, daß dieser Zusammenhang nichtlinear ist. Er läßt sich nach Gleichung (2.40) gut mit einem Durchbiegungsparameter von $b_E = 0,9$ eV beschreiben. Ein ähnlicher Wert von $b = (0,91 \pm 0,14)$ wurde bereits durch Reflexionsuntersuchungen an AlGaIn-Schichten auf AlN-Puffern gefunden [120].

Die CPBS oberhalb von 7 eV zeigen ebenfalls eine Energiewerschiebung mit x . Sie ist allerdings deutlich geringer als bei der Bandkante. Es fällt auf, daß E_2 und E_3 mit steigendem Al-Anteil scheinbar zusammenlaufen, so daß sie in den Spektren für die beiden Proben mit 45% und 53% kaum noch getrennt wahrnehmbar sind. Für eine genauere Bestimmung der Übergangsenergien wird wiederum die Methode der dritten Ableitung verwendet. Exemplarisch ist dies in Abbildung 6.17 für die Proben mit 11% und 45% Al-Anteil demonstriert. Die Kurven lassen sich nach Gleichung (6.4) mit $m = 7$ repro-

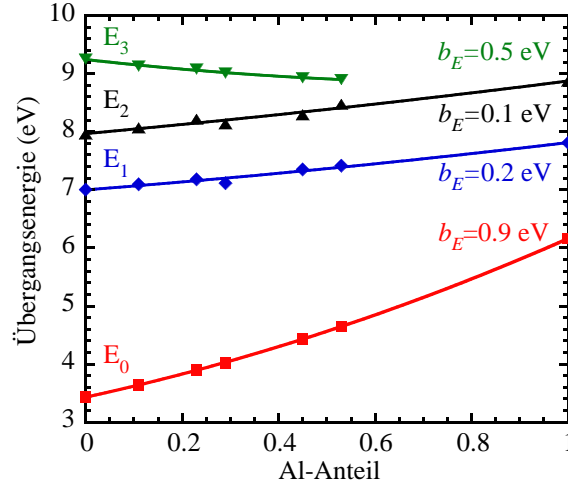


Abbildung 6.18: Energien der kritischen Punkte der Bandstruktur von AlGaIn in Abhängigkeit vom Al-Anteil. Zahlen bezeichnen die jeweiligen Durchbiegungsparameter.

duzieren. Dies entspricht einem eindimensionalen kritischen Punkt. Es ist anzumerken, daß die Anpassung nicht sonderlich sensitiv auf den Parameter m ist. Die Energieposition der CPBS wird aber nicht durch die richtige Wahl von m beeinflusst. Die Konsistenz der Daten ist dadurch gegeben, daß die unabhängige Anpassung für Real- und Imaginärteil zum gleichen Ergebnis führt, abgesehen von einem Phasenunterschied von 90° .

Die Ergebnisse für die Übergangsenergien aller Proben sind in Abbildung 6.18 zusammengefaßt. Die Werte für die binäre Verbindung AlN wurden Referenz [121] entnommen. Alle gezeigten CPBS erfahren eine kontinuierliche Verschiebung mit x . Für E_1 und E_2 steigt die Energie mit wachsendem Al-Anteil. Hingegen ist das Verhalten von E_3 umgekehrt. Dieser CPBS verschiebt zu niedrigeren Energien, um für hohe Al-Gehalte mit E_2 zu überlappen. Eine solche Abhängigkeit ist ungewöhnlich und widerspricht z.B. Bandstrukturrechnungen mittels der Pseudopotentialmethode [122]. Allen höherenergetischen CPBS ist die Tatsache gemein, daß ihre Energieverschiebung deutlich geringer ausfällt als für die Bandkante. Im Gegensatz zu Referenz [121] zeigen die Daten alle eine schwache Durchbiegung mit Werten von $b_E = 0,2$ eV, $0,1$ eV und $0,5$ eV für E_1 , E_2 und E_3 . Dies mag an der inzwischen gestiegenen Wachstumsqualität liegen, welche eine bessere Auflösung der CPBS ermöglicht.

6.1.3 Analytisches Modell

Mit Hilfe der experimentellen Daten konnte die DF von AlGa_N für verschiedene Mischkristallzusammensetzungen gewonnen werden. Für die Modellierung optoelektronischer Bauelemente ist es allerdings wünschenswert, eine analytische Beschreibung des Real- und Imaginärteils der DF sowohl unterhalb als auch oberhalb der Bandkante zu entwickeln. Einige halbempirische Modelle wurden in Referenz [123] verglichen. Aufgrund der damaligen schlechten Datensituation wurde jedoch keine systematische Variation der Mischkristallparameter gefunden. Eine weitere Ursache liegt darin, daß die für andere Halbleiter etablierten Einteilchenmodelle aufgrund der starken exzitonischen Wechselwirkung für Nitridhalbleiter nicht anwendbar sind. Für GaN wurde auch demonstriert, daß zumindest die Nichtparabolizität des Leitungsbandes zu berücksichtigen ist [124].

Für die Beschreibung der DF beginnt man gewöhnlich mit dem Imaginärteil. Dieser läßt sich aufteilen in einen bandkantennahen ($\varepsilon_{2,\text{low}}$) und einen hochenergetischen Bereich ($\varepsilon_{2,\text{high}}$). Der Erste ist bestimmt durch die gebundenen exzitonischen Zustände sowie das Exzitonenkontinuum, welche in den Gleichungen (2.48) und (2.49) beschrieben werden. Meist wird bei Messungen nur der unterste gebundene Zustand ($n = 1$) beobachtet. Außerdem ist die spektrale Abhängigkeit für die Anwendung auf reale Experimente noch mit einer Verbreiterungsfunktion zu falten:

$$\varepsilon_{2,\text{low}}(\omega) = \sum_{j=\text{A,B,C}} \frac{A_{\text{BS}} \hbar \omega \Gamma_{\text{BS}}}{((E_j - E_{\text{b}})^2 - \hbar^2 \omega^2)^2 + (\hbar \omega \Gamma_{\text{BS}})^2} + \sum_{j=\text{A,B,C}} \frac{A_{\text{CS}}}{\hbar \omega} \frac{1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\hbar \omega - E_j}{\Gamma_{\text{CS}}}\right)}{1 - \exp\left(-2\pi \sqrt{\frac{E_{\text{b}}}{|\hbar \omega - E_j|}}\right)}. \quad (6.6)$$

Die gebundenen Zustände (BS) unterhalb der Bandkante werden durch den Imaginärteil gedämpfter Lorentzoszillatoren repräsentiert (erster Term), deren Energie der um die effektive Rydbergenergie verminderte Bandabstand ist. Wegen der optischen Auswahlregeln genügt für GaN die Summation über den A- und den B-Übergang, während für AlN über A und C zu summieren ist. Die jeweiligen Amplituden A_{BS} und Verbreiterungen Γ_{BS} der beitragenden Übergänge werden zur Vereinfachung als gleich angenommen. Der zweite Term der Gleichung beschreibt die Zustände des Exzitonenkontinuums (CS). Der gewöhnlich verwendete Term $A_{\text{CS}}/\hbar^2 \omega^2$ wurde hier durch $A_{\text{CS}}/\hbar \omega$ ersetzt, um der Nichtparabolizität der Bänder Rechnung zu tragen. Die Fehlerfunktion ist durch

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\tau^2} d\tau \quad (6.7)$$

gegeben.

Die hochenergetischen CP können aufgrund ihrer deutlichen exzitonischen Verstärkung

ebenfalls durch gedämpfte Lorentz-Oszillatoren beschrieben werden. Dieser Bereich der DF erhält damit die Form

$$\varepsilon_{2,\text{high}}(\omega) = \sum_{j=\text{D},1,2,3} \frac{A_j \hbar \omega \Gamma_j}{(E_j^2 - \hbar^2 \omega^2)^2 + (\hbar \omega \Gamma_j)^2} \cdot \left(\frac{\hbar \omega - E_A}{E_j - E_A} \mathcal{H}(E_j - \hbar \omega) + \mathcal{H}(\hbar \omega - E_j) \right). \quad (6.8)$$

Der lineare Abfall der Funktion in Richtung der Bandkante E_A wird eingeführt, um die sonst auftretende künstliche Absorption unterhalb der Bandlücke im Modell zu verhindern. Der Index D trägt einem kürzlich in m -orientiertem GaN gefundenen schwachen Übergang bei 6,36 eV Rechnung [125], auch wenn dieser in den hier gezeigten Spektren nicht auflösbar ist.

Der Realteil der DF folgt aus dem Realteil der verwendeten Lorentz-Oszillatoren für die gebundenen Exzitonen sowie die höherenergetischen CPBS. Nimmt man für den Beitrag des Exzitonenkontinuums zu $\varepsilon_2(\omega)$ zwischen E_A und einem fiktiven kritischen Punkt bei E_P eine Konstante an, so ergibt die Kramers-Kronig-Transformation hierfür eine Logarithmusfunktion. Um Singularitäten zu vermeiden, ist dann zur Photonenenergie für diesen Term ein Imaginärteil dazuzuaddieren ($\hbar \omega \rightarrow \hbar \omega + i\Gamma_0$). Für die Kramer-Kronig-Transformation muß $\varepsilon_2(\hbar \omega)$ streng genommen von 0 bis $\hbar \omega \rightarrow \infty$ bekannt sein. Da der Energiebereich der experimentellen Daten jedoch beschränkt ist, werden alle hochenergetischen Oszillatoren außerhalb des Meßbereiches zu einer Deltafunktion bei der Energie E_P zusammengefaßt. Zusätzlich ist noch eine Konstante \mathcal{O} zu addieren. Letztendlich erhält man für den Realteil der DF

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(\omega) = \mathcal{O} + \sum_{j=\text{A},\text{B},\text{C}} & \left(\frac{A_{\text{BS}} ((E_j - R^*)^2 - \hbar^2 \omega^2)}{((E_j - R^*)^2 - \hbar^2 \omega^2)^2 + (\hbar \omega \Gamma_{\text{BS}})^2} \right) \\ & + \frac{1}{\pi} \Re e \left(A_0 \ln \frac{E_P^2 - (\hbar \omega + i\Gamma_0)^2}{E_A^2 - (\hbar \omega + i\Gamma_0)^2} + \frac{A_P E_P}{E_P^2 - (\hbar \omega + i\Gamma_0)^2} \right) \\ & + \sum_{j=\text{D},1,2,3} \frac{A_j (E_j^2 - \hbar^2 \omega^2)}{(E_j^2 - \hbar^2 \omega^2)^2 + (\hbar \omega \Gamma_j)^2}. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Auch hier kann bei GaN der C-Übergang sowie bei AlN der B-Übergang vernachlässigt werden.

Paßt man die Parameter in dem Modell an die DF von GaN und AlN an, so erhält man die Werte in Tabelle 6.1, wobei E_D für GaN auf 6,36 eV festgelegt wurde. In Abbildung 6.19 wird die Modellanpassung mit experimentellen Daten für GaN verglichen. Obwohl das Modell nicht jedes Detail der DF reproduziert, wird die dielektrische Funktion über den gesamten Energiebereich mit hinreichender hoher Genauigkeit wiedergegeben.

Das Modell eröffnet die Möglichkeit, die DF für $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ für jede beliebige Zusammensetzung zu berechnen. Dazu muß zwischen den in Tabelle 6.1 angegebenen Werten für

6.1. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON (AL)GAN(0001)

Tabelle 6.1: Modellparameter für die Berechnung der ordentlichen DF von GaN und AlN.

Parameter		GaN		AlN	
R^* (meV)		25		50	
E_A (eV)	E_B bzw. E_C (eV)	3,447	3,452	6,213	6,227
A_{BS} (eV ²)	Γ_{BS} (eV)	0,082	0,037	0,462	0,080
A_{CS} (eV)	Γ_{CS} (eV)	1,163	0,033	3,411	0,055
A_0	Γ_0 (eV)	1,612	0,022	1,897	0,030
A_P (eV)	E_P (eV)	69,54	13,43	118,3	14,46
E_D (eV)	Γ_D (eV)	6,360	1,686	8,207	0,684
A_D (eV ²)		12,03		17,06	
E_1 (eV)	Γ_1 (eV)	6,940	0,626	7,800	0,510
A_1 (eV ²)		31,81		21,16	
E_2 (eV)	Γ_2 (eV)	7,907	0,924	8,950	1,335
A_2 (eV ²)		30,84		62,12	
E_3 (eV)	Γ_3 (eV)	9,214	1,838	8,841	1,838
A_3 (eV ²)		63,27		0	
\mathcal{O}		-0,041		-0,929	

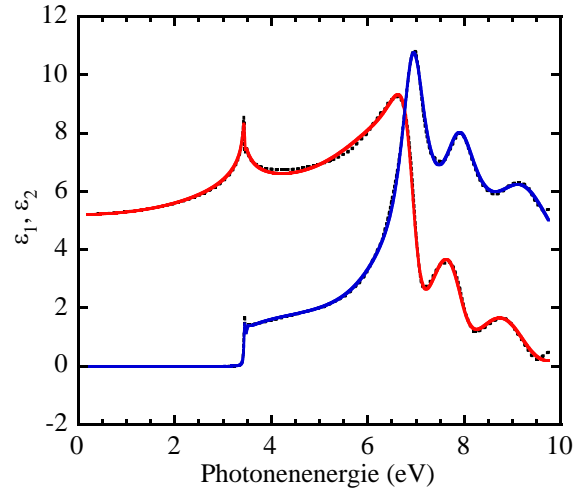


Abbildung 6.19: Vergleich der experimentell bestimmten DF von GaN (schwarz gepunktet) mit analytischem Modell nach Gleichungen (6.9) bzw. (6.6) und (6.8) (farbige Linien).

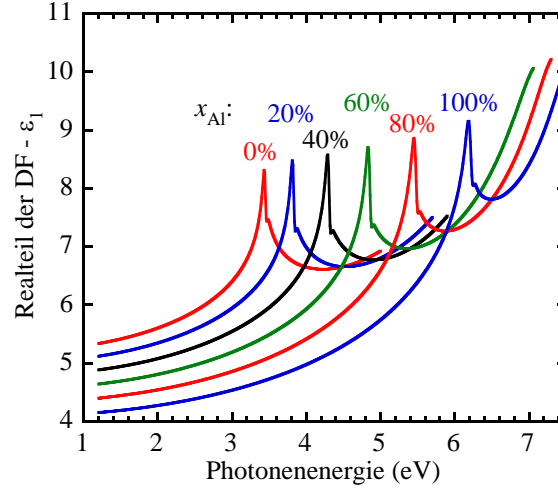


Abbildung 6.20: Mittels analytischem Modell berechneter Realteil der DF von AlGaIn in Abhängigkeit vom Al-Anteil.

GaN und AlN interpoliert werden. Für die CPBS-Energien ist bereits bekannt, daß die Abhängigkeit von x mit einem Durchbiegungsparameter b_E verknüpft ist (siehe Abbildung 6.18). Auch für die Amplituden und Verbreiterungen darf ein nichtlinearer Zusammenhang vermutet werden. Aus diesem Grund werden auch hier Durchbiegungsparameter eingeführt. Diese werden allerdings nicht willkürlich festgelegt, sondern die Zahlenwerte sollen dabei proportional zum jeweiligen Wert von b_E des betreffenden CPBS sein. Die Berechnungen der Amplituden und Verbreiterungen ergeben sich damit aus

$$A_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = xA_{\text{AlN}} + (1-x)A_{\text{GaN}} - b_A x(1-x), \quad (6.10)$$

$$b_A = \frac{A_{\text{AlN}} - A_{\text{GaN}}}{E_{\text{AlN}} - E_{\text{GaN}}} \cdot b_E, \quad (6.11)$$

$$\Gamma_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = x\Gamma_{\text{AlN}} + (1-x)\Gamma_{\text{GaN}} - b_\Gamma x(1-x), \quad (6.12)$$

$$b_\Gamma = \frac{\Gamma_{\text{AlN}} - \Gamma_{\text{GaN}}}{E_{\text{AlN}} - E_{\text{GaN}}} \cdot b_E. \quad (6.13)$$

Abbildung 6.20 zeigt die DF für AlGaIn mit verschiedenem Al-Anteil, welche nach dem analytischen Modell berechnet wurden. Wie man an den Kurven sehen kann, genügt eine simple Parallelverschiebung der Kurven nicht, um die DF für Mischkristalle richtig wiederzugeben. Das oben entwickelte Modell stellt ein einfaches, aber vergleichsweise genaues Werkzeug dar, um die DF von AlGaIn für eine beliebige Zusammensetzung berechnen zu können.

6.2 Dielektrische Funktion von GaN(11 $\bar{2}$ 0)

Bei Proben, deren Wachstumsrichtung entlang der a -Achse verläuft, befindet sich die c -Achse, welche zugleich die optische Achse ist, in der Wachstumsebene. Dreht man die Probe um die a -Achse, so lassen sich für senkrechten Lichteinfall Positionen finden, in denen das Licht senkrecht bzw. parallel zur optischen Achse polarisiert ist. Dementsprechend ist die optische Antwort dann ausschließlich durch die ordentliche bzw. die außerordentliche DF bestimmt. Zwischen diesen Orientierungen tragen beide Komponenten zum Meßsignal bei. Bei der Ellipsometrie ist der Einfallswinkel von Null verschieden und das Meßlicht besteht sowohl aus einem senkrecht als auch aus einem parallel polarisierten Anteil. Doch auch hier wird ein unterschiedliches Verhalten erwartet, wenn die c -Achse in der Einfallsebene oder senkrecht dazu liegt.

6.2.1 Bandkantennaher Bereich

Zunächst soll der Bereich der Bandkante diskutiert werden. Die Ellipsometriemessungen mit dem Laborellipsometer wurden viermal durchgeführt, wobei die Probe bei jeder Messung um jeweils 45° um die a -Achse gedreht wurde. Obwohl die Lage der c -Achse durch Röntgenuntersuchungen festgestellt wurde, sind Montageungenauigkeiten der kleinen Proben auf dem Probenteller nicht auszuschließen. Durch die vier Messungen mit jeweils um genau 45° unterschiedlichem Winkel der optischen Achse zur Einfallsebene, kann dieser Winkel dann während der Datenanalyse als Anpassungsparameter gewählt werden. Auch wenn die Lage der c -Achse vorher nicht exakt bekannt ist, so ist es durch diese Prozedur möglich, jene zu bestimmen.

Abbildung 6.21 zeigt die Pseudo-DF von Probe MD2 für drei Probenorientierungen für die Einfallswinkel von 62°, 68° und 74°. Die jeweilige Orientierung der c -Achse wird durch den Eulerwinkel in den Spektren angegeben. Ein Winkel von $\phi = 0$ (90°) bedeutet, daß die optische Achse senkrecht (parallel) zur Einfallsebene liegt. Dabei wird das Spektrum durch die ordentliche (außerordentliche) DF dominiert. Bei $\phi = 45^\circ$ tragen beide Komponenten zur optischen Antwort bei. Unterhalb der Absorptionskante finden sich in allen Spektren Interferenzoszillationen. Für $\phi = 0$ und 90° sind diese normal ausgeprägt. Dabei sind die Energiepositionen der Extrema nicht gleich aufgrund der leicht unterschiedlichen Brechungsindizes für die ordentliche und die außerordentliche Polarisationsrichtung. Bei $\phi = 45^\circ$ tritt bei der Betrachtung der Einhüllenden der Oszillationen eine Art Schwebung auf, bedingt durch die Vermischung der beiden Komponenten der DF. Mit Hilfe eines Schichtmodells, bestehend aus dem r -achsenorientierten

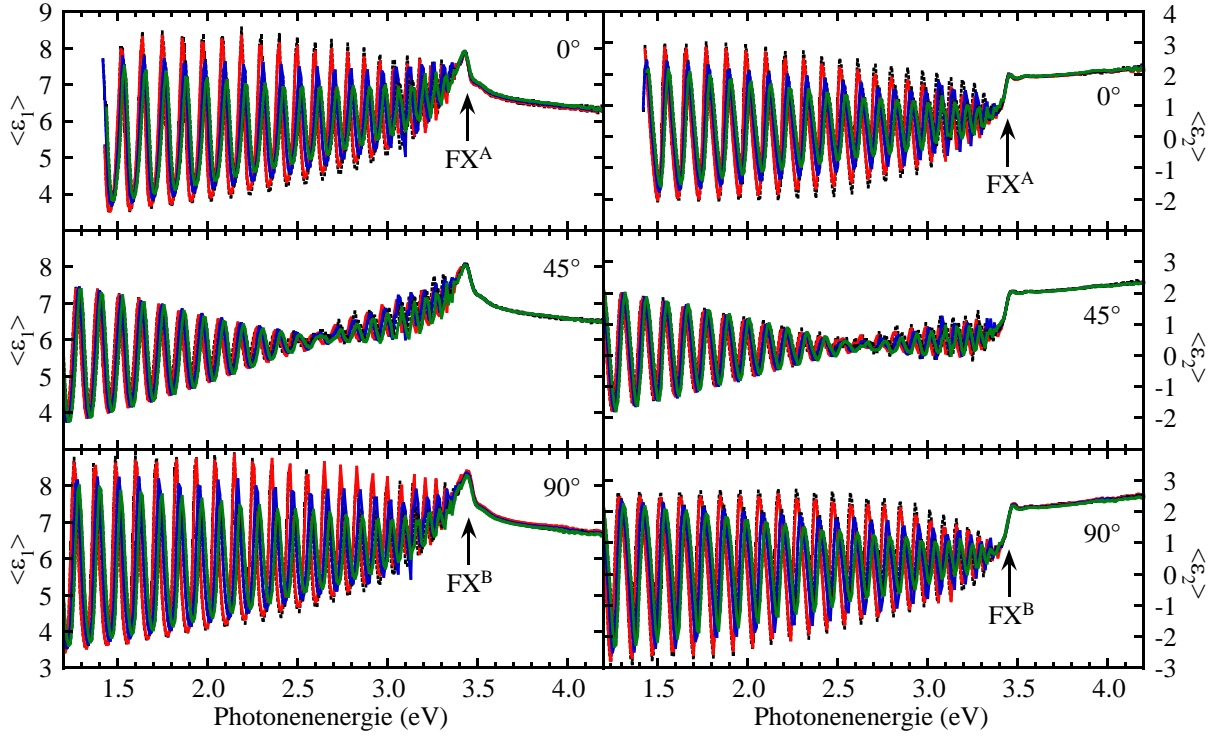


Abbildung 6.21: Real- (links) und Imaginärteil (rechts) der pseudodielektrischen Funktion von Probe MD2 für drei Orientierungen der optischen Achse bezüglich der Einfallsebene (0° (senkrecht), oben; 90° (parallel), unten; 45° , Mitte). Experimentelle Daten (schwarz gepunktet) und Modellanpassung für die drei Einfallswinkel 62° (rot), 68° (blau) und 74° (grün). Dominante Absorptionskante mit Pfeil gekennzeichnet.

Saphir($1\bar{1}02$)-Substrat, der Nukleationsschicht mit Grenzflächenrauhigkeit, der zu untersuchenden GaN($11\bar{2}0$)-Schicht und einer Oberflächenrauhigkeit von ca. 2 nm lassen sich die Beobachtungen in den Pseudo-DF sehr gut reproduzieren. Dabei werden alle Schichten in dem Modell als anisotrop angenommen. Zu beachten ist, daß die Projektion der optischen Achsen des Saphirsubstrates und der GaN-Schicht auf die Wachstumsebene für beide in die gleiche Richtung weist. Die c -Achse des Saphirs besitzt allerdings einen Winkel von $32,4^\circ$ gegenüber der Probenoberfläche.

Nach der erfolgreichen Anpassung des Modells an die experimentellen Daten (farbige Linien in Abbildung 6.21) lassen sich diesem die ordentliche und die außerordentliche DF entnehmen. Die Resultate für Probe MD2 werden in Abbildung 6.22 verglichen. Bei der Absorptionskante ist für beide Orientierungen eine deutliche exzitonische Spitze sichtbar.

6.2. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON GAN(11 $\bar{2}$ 0)

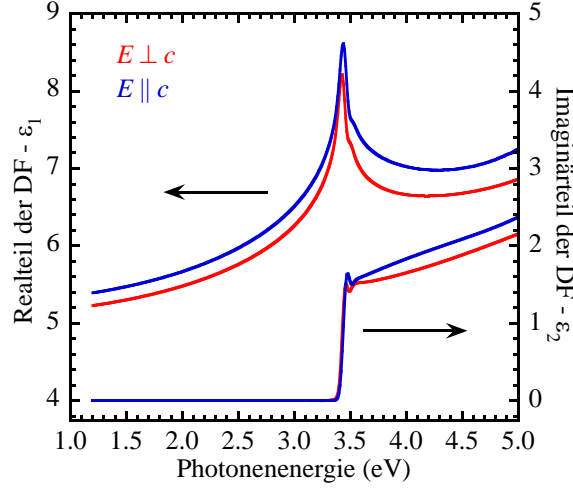


Abbildung 6.22: Real- und Imaginärteil der ordentlichen (rot) und außerordentlichen DF (blau) von Probe MD2.

Dies demonstriert die hohe Probenqualität und Fortschritte in der Wachstumstechnik in den vergangenen Jahren. Beim Betrachten der Abbildung fällt auf, daß der Realteil der außerordentlichen DF $\varepsilon_{1\parallel}$ im gesamten Spektralbereich größer ist als das ordentliche $\varepsilon_{1\perp}$. Dies ist konsistent mit früheren Resultaten für den transparenten Energiebereich [46] und insbesondere ein wichtiges Ergebnis für den Entwurf von Resonatoren und Wellenleiterstrukturen.

Die festgestellte Anisotropie sollte sich in einer polarisationsabhängigen Reflektivität der Proben äußern. Dies ist mit der unabhängigen Methode der Reflexionsanisotropiespektroskopie (RAS) nachweisbar. Das RAS-Signal ist gegeben durch die Differenz der komplexen Fresnelkoeffizienten senkrecht und parallel zur optischen Achse, dividiert durch ihren Mittelwert:

$$\frac{\Delta \hat{r}}{\hat{r}} = \frac{2(\hat{r}_{\perp} - \hat{r}_{\parallel})}{\hat{r}_{\perp} + \hat{r}_{\parallel}}. \quad (6.14)$$

Mit der erlangten anisotropen DF und dem Schichtmodell der Ellipsometriemessungen ist es möglich, das RAS-Spektrum für senkrechten Lichteinfall zu berechnen. Das Resultat für Probe MD3 ist in Abbildung 6.23 abgebildet (durchgezogene rote Linie). Alle Besonderheiten in der Linienform der von C. Werner gemessenen experimentellen Daten (Symbole) werden gut reproduziert, was die Genauigkeit der aus der SE erhaltenen spektralen Abhängigkeit von ε_{\perp} und ε_{\parallel} beweist. Die Oszillationen unterhalb von 3.42 eV stammen von Schichtdickeninterferenzen, welche durch die wechselnden Brechungsindizes beeinflußt werden (siehe Gleichung (4.10)). Das Maximum bei 3.46 eV ist der Anisotropie nahe der GaN-Bandkante zugeordnet. Es ist zu beachten, daß das Signal im gesamten

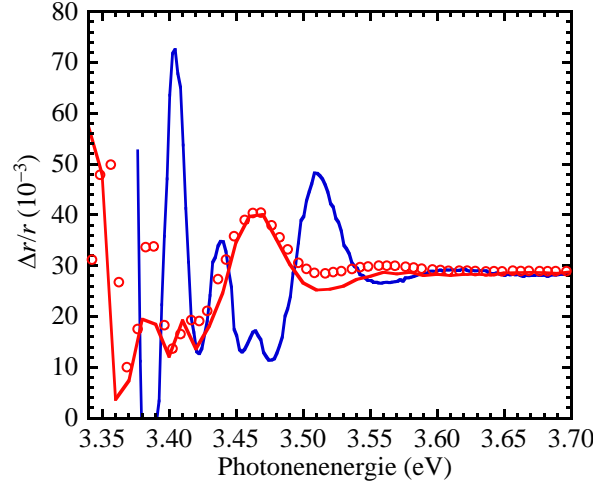


Abbildung 6.23: Experimentelle RAS-Spektren von Probe MD3 bei $T = 110$ K (blaue Linie) und RT (Symbole) sowie aus anisotroper DF berechnete Kurve für RT (rote Linie).

dargestellten Spektralbereich positiv und von Null verschieden ist. Ursache hierfür ist das im Vergleich zu $\hat{\varepsilon}_{\perp}$ durchgängig höhere $\hat{\varepsilon}_{\parallel}$. Blickt man auf die experimentellen Daten für $T = 110$ K (blaue Linie in Abbildung 6.23), stellt man fest, daß die Kurve gegenüber Raumtemperatur wie erwartet um 50 meV blauverschoben ist. Das Signal bei 3,51 eV ist deutlicher ausgeprägt und schmäler, was auf eine geringere Verbreiterung der exzitonen Absorptionskante bei tiefen Temperaturen hinweist.

Gemäß den optischen Auswahlregeln sollte zwischen ordentlicher und außerordentlicher Absorptionskante eine Verschiebung zu beobachten sein. Hierfür ist der bandkanten-nahe Bereich von ε_2 im oberen Teil von Abbildung 6.24 vergrößert dargestellt. Offenbar kommt es bei Probe MD2 zu einer Energieverschiebung von 13 meV zwischen den Polarisationsrichtungen. Für die Proben MD1 und MD3 betragen die Werte 14 und 18 meV. Für m -achsenorientiertes GaN(1 $\bar{1}$ 00) auf LiAlO₂ ist die Aufspaltung mit 50 meV deutlich größer [126]. Die zwei Absorptionskanten entsprechen FX^A und FX^B , deren Oszillatorstärken sich für Licht, welches senkrecht oder parallel zur optischen Achse polarisiert ist, unterscheiden [60]. Diese Annahme wird unterstützt durch die im unteren Teil von Abbildung 6.24 gezeigten polarisationsabhängigen PR-Messungen. Durch die geringen Ladungsträgerdichten der Proben, sind die internen elektrischen Felder nur schwach. Dies resultiert in sehr geringen PR-Signalen. Dennoch läßt sich eindeutig ablesen, daß das PR-Spektrum für $E \perp c$ von FX^A dominiert wird, während für $E \parallel c$ FX^B besonders hervortritt. Hier ist FX^A nur schwach ausgeprägt. FX^C kann für keine der Orientierungen

6.2. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON GAN(11 $\bar{2}$ 0)

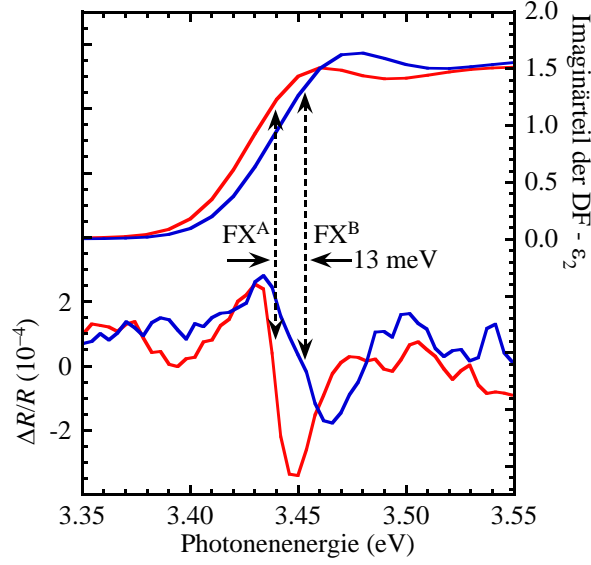


Abbildung 6.24: Imaginärteil der DF und PR-Spektrum von Probe MD2 für $E \perp c$ (rot) und $E \parallel c$ (blau). FX^A und FX^B durch Pfeile gekennzeichnet.

Tabelle 6.2: Verspannung der a -achsenorientierten GaN-Proben.

Probe	ϵ_{xx} (10^{-3})	ϵ_{yy} (10^{-3})	ϵ_{zz} (10^{-3})
MD1	1,36	-2,16	-2,08
MD2	1,11	-1,91	-1,78
MD3	0,922	-1,73	-1,47

eindeutig aufgelöst werden.

Möchte man dieses Verhalten besser verstehen, so kann man die in Kapitel 2.1 beschriebenen $(6 \times 6)\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Rechnungen durchführen, indem man ϵ aus den Gitterkonstanten in Tabelle 5.2 berechnet. Die kompressive Verspannung in der Wachstumsebene (y, z -Ebene) nimmt von Probe MD1 über Probe MD2 zu Probe MD3 ab. Die entsprechenden Werte sind in Tabelle 6.2 aufgeführt und können mit den Parametern aus Tabelle 2.2 in Matrix (2.28) eingesetzt werden. Damit sind die resultierenden exzitonenischen Übergangsenergien und ihre relativen Oszillatorstärken für die Polarisierung in der Wachstumsebene bestimmbar. Die dritte Polarisationsrichtung ist für die dargestellten Experimente nicht zugänglich. Als Werte für unverspannte Übergangsenergien wurden 3,423, 3,428 und 3,446 eV für FX^A , FX^B und FX^C angenommen. Die Ergebnisse sind in Tabelle 6.3 zusammengefaßt und mit dem Experiment verglichen. Es zeigt sich, daß die theoretische

Tabelle 6.3: Berechnete und experimentell bestimmte Übergangsenergien der a -achsenorientierten GaN-Proben mit relativen Oszillatorstärken für senkrecht (f_y) und parallel zur c -Achse polarisiertes Licht (f_z).

Probe	Übergang	Übergangsenergie (eV)		rel. Oszillatorstärke	
		Theorie	Experiment	f_y	f_z
MD1	FX ^A	3.439	3.444	87%	8%
	FX ^B	3.454	3.458	12%	81%
	FX ^C	3.478		1%	11%
MD2	FX ^A	3.438	3.440	82%	12%
	FX ^B	3.452	3.453	16%	78%
	FX ^C	3.473		1%	10%
MD3	FX ^A	3.436	3.441	75%	18%
	FX ^B	3.451	3.459	23%	73%
	FX ^C	3.469		2%	9%

Vorhersage und das Experiment gut zusammenpassen. Die Übergangsenergien stimmen innerhalb von 5 meV miteinander überein, was die experimentelle Genauigkeit widerspiegelt. Lediglich FX^B von Probe MD3 zeigt eine geringfügig größere Abweichung. Ebenso zeugt der Vergleich von der Verlässlichkeit des für die Rechnung verwendeten Parametersatzes.

Im Hinblick auf die Oszillatorstärken läßt sich feststellen, daß die ordentliche Absorptionskante stets von FX^A dominiert wird. Ist das Licht parallel zur c -Achse polarisiert, ist dieser Übergang eigentlich nach Gleichung (2.17) verboten. Für m -achsenorientiertes GaN auf LiAlO₂ ist die Oszillatorstärke in der Tat auch fast Null [126]. Bemerkenswerterweise ist der A-Übergang durch die biaxial anisotrope Verspannung für die hier untersuchten a -achsenorientierten GaN-Filme erlaubt. Offenbar tritt in der außerordentlichen DF eine Verbreiterung der Absorptionskante auf, welche nicht mit der Probenqualität in Zusammenhang steht. Vielmehr beobachtet man einen dominierenden FX^B-Übergang, welchem auf der niederenergetischen Seite der zwar schwache, aber dennoch vorhandene FX^A-Übergang vorgelagert ist. Dies wird z.B. im PR-Spektrum von Abbildung 6.24 sichtbar und trägt dazu bei, die Analyse von $\hat{\varepsilon}_{||}$ zu erschweren. Der C-Übergang hat für beide Polarisationsrichtungen eine relativ kleine Übergangswahrscheinlichkeit. Aus diesem Grund ist er auch in den ohnehin schwach ausgeprägten PR-Spektren nicht zu beobachten.

6.2. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON GAN(11 $\bar{2}$ 0)

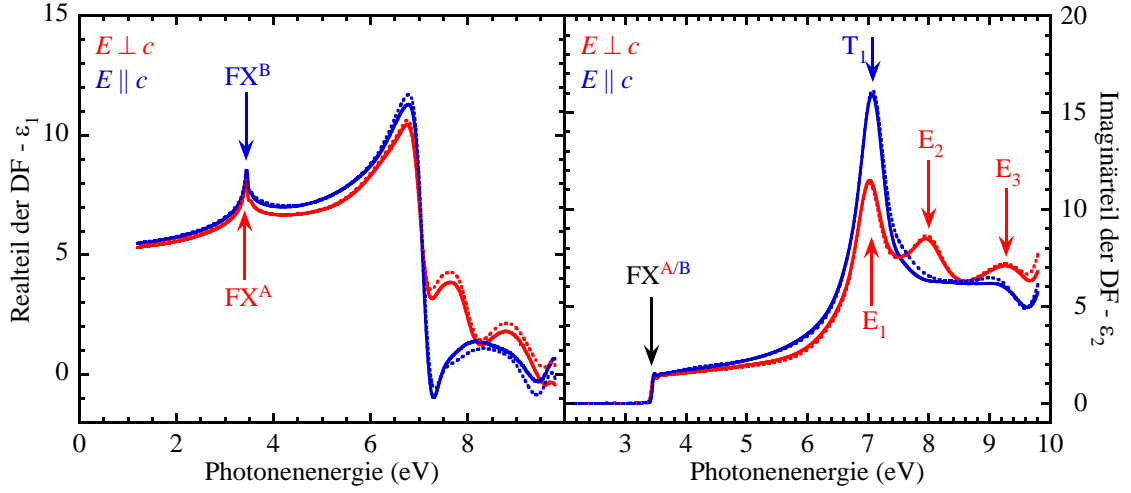


Abbildung 6.25: Ordentliche (rot) und außerordentliche Komponente (blau) der anisotropen DF der Proben MD1 (durchgezogen) und MD3 (gepunktet). Jeweilige CPBS mit Pfeilen gekennzeichnet.

6.2.2 Hochenergetischer Bereich

Nach den Untersuchungen nahe der Bandkante soll nun auch der Bereich bis 10 eV betrachtet werden. Bei den Messungen am BESSY-Ellipsometer beschränken sich die Messungen auf zwei Probenorientierungen. Die c -Achse, deren Lage aus den Laboruntersuchungen bestimmt wurde, befand sich hierbei einmal senkrecht und einmal parallel zur Einfallsebene. Das verwendete Modell wurde bereits bei den niederenergetischen Spektren beschrieben. Während in der Literatur stets nur pseudodielektrische Funktionen gezeigt wurden, sind in Abbildung 6.25 die aus dem Modell extrahierten anisotropen DF für die am meisten und die am geringsten verspannte Probe zu sehen. Die Kurven für die beiden Proben sind über weite Teile des Spektrums nahezu deckungsgleich. Dies beweist den volumenartigen Charakter der bestimmten DF, welche lediglich vom Material und nicht von der jeweiligen Probe abhängen sollte. Die geringfügigen Abweichungen im hochenergetischen Bereich können von minimalen Ungenauigkeiten bei der Ausrichtung der c -Achse, bedingt durch die Montage der Probe in der UHV-Kammer, herrühren.

Der Imaginärteil der ordentlichen DF zeigt oberhalb von 6 eV drei ausgeprägte Maxima, welche den CPBS E_1 , E_2 und E_3 zugeordnet sind. Dieses Verhalten ist bereits von den c -achsenorientierten Proben in Kapitel 6.1.1 bekannt, bei denen die optischen Eigenschaften durch die ordentliche DF dominiert sind (siehe Abbildung 6.8). Während der niederenergetische Teil von $\epsilon_{1\parallel}$ und $\epsilon_{2\parallel}$ der ordentlichen DF sehr ähnlich sieht, ist der hochenergetische Teil durch einen einzigen großen Oszillator bei ~ 7 eV bestimmt.

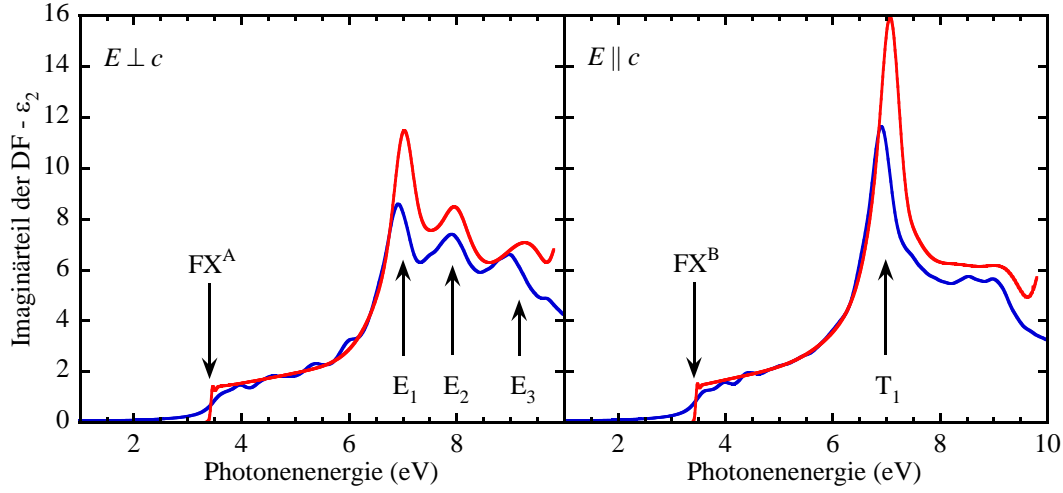


Abbildung 6.26: Vergleich des experimentell bestimmten Imaginärteils der anisotropen DF von GaN der Probe MD1 (rot) mit Rechnungen aus [127,128] (blau) für $E \perp c$ und $E \parallel c$.

Dieser wird im Weiteren mit T_1 bezeichnet. Seine energetische Lage fällt nahezu mit der des ordentlichen E_1 zusammen. Allerdings ist seine Amplitude deutlich größer. Wegen der Kramers-Kronig-Relation erklärt dieser Umstand die Tatsache, daß $\varepsilon_{1\parallel}$ im gesamten Bereich unterhalb von 7 eV größer ist als $\varepsilon_{1\perp}$. Wie bereits erwähnt, wirkt sich dies entscheidend auf den Brechungsindex optischer Bauelemente aus. Bemerkenswert ist, daß die hohe Amplitude von T_1 dazu führt, daß zwischen 7 und 8 eV ein Gebiet existiert, in dem $\varepsilon_{1\parallel}$ negativ ist.

Um die Qualität der erlangten Daten besser evaluieren zu können, soll hier ein Vergleich mit theoretischen Arbeiten vorgenommen werden. Benedict u.a. führten sogenannte *first principles*-Rechnungen durch, bei denen sie auch die Elektron-Loch-Wechselwirkung berücksichtigten [127,128]. Abbildung 6.26 vergleicht ihre Ergebnisse mit den hier vorgestellten experimentellen Daten. Die prinzipielle Linienform ist identisch und alle entscheidenden Besonderheiten der Spektren werden für beide Polarisationsrichtungen reproduziert. Die höhere Amplitude im Experiment deutet auf eine hohe Kristallinität der Proben sowie auf eine geringe Verschmutzung und Rauigkeit der Oberfläche hin. Die fallende Amplitude der Maxima in $\varepsilon_{2\perp}$ von E_1 über E_2 zu E_3 unterstützt die theoretische Behauptung, daß die Elektron-Loch-Wechselwirkung entscheidende Bedeutung hat und die Spektren auch fern der Bandkante stark von exzitonischen Effekten beeinflusst sind. Ohne die Elektron-Loch-Wechselwirkung würde man ein Ansteigen der Maxima erwarten. Die Energieposition und hohe Amplitude von T_1 für $E \parallel c$ ist ein weiteres Anzeichen dafür,

6.2. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON GAN(11 $\bar{2}$ 0)

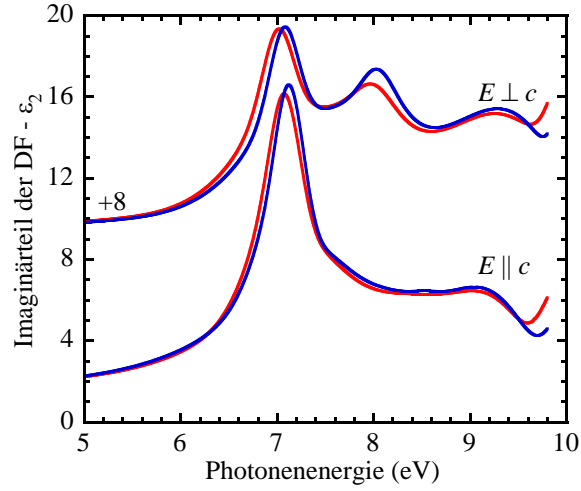


Abbildung 6.27: Ordentliche und außerordentliche DF von Probe MD3 bei Raumtemperatur (rot) und $T = 160$ K (blau).

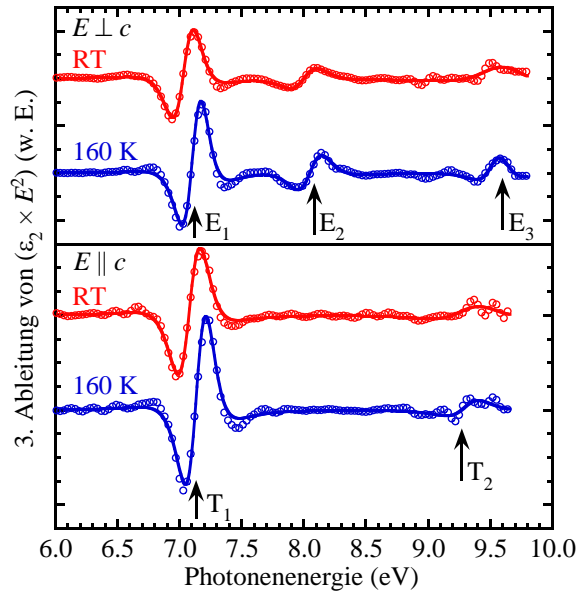


Abbildung 6.28: Experimentelle Daten (Symbole) und Anpassung (Linien) der dritten Ableitung des mit der quadrierten Photonenenergie multiplizierten Imaginärteils der DF von Probe MD3 bei Raumtemperatur (rot) und $T = 160$ K (blau). CPBS mit Pfeilen gekennzeichnet.

daß die Elektron-Loch-Wechselwirkung nicht zu vernachlässigen ist (siehe Abbildung 4 in Referenz [127]).

Tabelle 6.4: Energien der CPBS der GaN(0001)-Proben für ordentliche und außerordentliche Polarisation. Daten in Klammern mit großer Unsicherheit.

sample		T (K)	E_1, T_1 (eV)	E_2 (eV)	E_3, T_2 (eV)
MD1	$E \perp c$	295	7,042	8,002	(9,58)
		150	7,108	8,058	(9,63)
	$E \parallel c$	295	7,101	-	(9,59)
		165	7,168	-	?
MD2	$E \perp c$	295	7,037	7,963	(9,50)
		160	7,095	8,023	9,48
	$E \parallel c$	295	7,091	-	?
		160	7,152	-	9,27
MD3	$E \perp c$	295	7,040	8,001	(9,56)
		160	7,117	8,058	(9,54)
	$E \parallel c$	295	7,080	-	(9,31)
		160	7,151	-	(9,28)

Um die Auflösung der CPBS in den Spektren zu steigern, wurden die Proben auf $T = 160$ K gekühlt. Die Messungen im hochenergetischen Bereich wurden bei dieser Temperatur wiederholt. Abbildung 6.27 zeigt den Vergleich der DF bei Raumtemperatur und $T = 160$ K von Probe MD3 für beide Polarisationsrichtungen. Das Spektrum ist offenbar nach dem Abkühlen um ~ 60 meV verschoben. Außerdem sind die Maxima erhöht und ihre Halbwertsbreite sinkt. Dies erleichtert die genaue Bestimmung der Übergangsenergien. Hierfür wird die bereits vorgestellte Methode der dritten Ableitung verwendet. Real- und Imaginärteil der Proben wurden mit Gleichung (6.4) angepaßt. Alle Übergänge lassen sich durch $n = 6$ bzw. $n = 7$ beschreiben. Dies entspricht einem zwei- oder eindimensionalen kritischen Punkt, wobei bemerkt sei, daß die Anpassung nicht sehr sensitiv auf diesen Parameter ist. Für Probe MD3 zeigt Abbildung 6.28 die experimentellen Kurven für ε_2 sowie ihre Anpassung für beide Temperaturen. Sie stimmen gut überein und ermöglichen es, für $E \perp c$ die Übergangsenergien von E_1 und E_2 zu bestimmen. Für $E \parallel c$ wird die Energie von T_1 ermittelt. Für die schwachen Signale oberhalb von 9 eV ist eine genaue Anpassung wegen der geringen Oszillatorstärken und des schlechteren Signal-Rausch-Verhältnisses in diesem Bereich nicht möglich.

Tabelle 6.4 faßt die temperaturabhängigen Ergebnisse aller drei Proben zusammen. Die RT-Energien des E_1 -Übergangs stimmen bis auf 50 meV mit früheren Messungen

6.2. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON GaN(11 $\bar{2}$ 0)

von Cobet an einer m -achsenorientierten Probe überein [125]. Ein genauer Vergleich der anderen Übergänge ist schwer möglich, da Cobet diese in verschiedene Komponenten aufteilt. In der Tat gibt es mehrere mögliche Interbandübergänge innerhalb eines engen Energiebereiches, die zur Absorption beitragen können [129,130]. Die hier gezeigten Daten erlauben keine derartig detaillierte Aufschlüsselung.

Zwischen Raumtemperatur und $\sim 160\text{K}$ tritt bei allen Übergängen eine Blauverschiebung um ca. 60 meV ein. Die Übergangsenergien sind von Probe zu Probe jeweils ähnlich. Im Rahmen der Genauigkeit läßt sich keine Aussage über die Abhängigkeit von der Verspannung machen. Es darf jedoch erwartet werden, daß sich die Verspannung ähnlich wie die Mischkristallzusammensetzung vor allem an der Bandkante bemerkbar macht und auf höherenergetische CPBS einen weniger starken Einfluß hat.

6.2.3 Vergleich von isotropem und anisotropem Modell

Die DF von GaN(0001) wurde mittels eines isotropen und die von GaN(11 $\bar{2}$ 0) mit einem anisotropen Modell ermittelt. Es gilt nun, anhand der gewonnenen Erkenntnisse zu überprüfen, inwieweit die Beschreibung von Proben durch ein isotropes Modell gerechtfertigt ist und ob sich die Annahme, die Eigenschaften derartiger Proben seien durch die ordentliche DF dominiert, bestätigt. Der entsprechende Vergleich der Imaginärteile der DF wird in Abbildung 6.29 angestellt. Die rote und die blaue Kurve sind bereits aus Abbildung 6.25 bekannt und zeigen $\varepsilon_{2\perp}$ und $\varepsilon_{2\parallel}$ von Probe MD3. Mit diesen bekannten Werten läßt sich in einem anisotropen Modell die Pseudo-DF eines halbumendlichen c -achsenorientierten GaN-Substrates bei einem Einfallswinkel von 68° berechnen (grüne Kurve). Der spektrale Verlauf entspricht nahezu dem von $\varepsilon_{2\perp}$. Lediglich die Höhen der Maxima ändern sich geringfügig mit dem Einfallswinkel. Der Einfluß von $\varepsilon_{2\parallel}$ bleibt weitgehend vernachlässigbar. Die Begründung ist darin zu sehen, daß der Brechungswinkel im GaN bei den auftretenden Brechungsindizes von über 2,3 auch bei hohem Einfallswinkel nie 26° überschreitet. Somit ist der parallel zur c -Achse polarisierte Anteil des Lichtes stets sehr klein. Den Nachweis liefert der Vergleich mit dem Imaginärteil der DF von Probe BS1, welcher aus einem isotropen Modell gewonnen wurde (schwarz gepunktet). Die Abbildung läßt erkennen, daß die grüne und die schwarze Kurve im Bereich bis 8,5 eV übereinstimmen. Überhaupt sind die Imaginärteile von ordentlicher DF, isotroper Näherung und anisotrop berechneter Pseudo-DF unterhalb von 7 eV deckungsgleich. Damit ist der eindeutige Nachweis erbracht, daß es zulässig ist, c -achsenorientierte Proben mit einem isotropen Modell zu beschreiben.

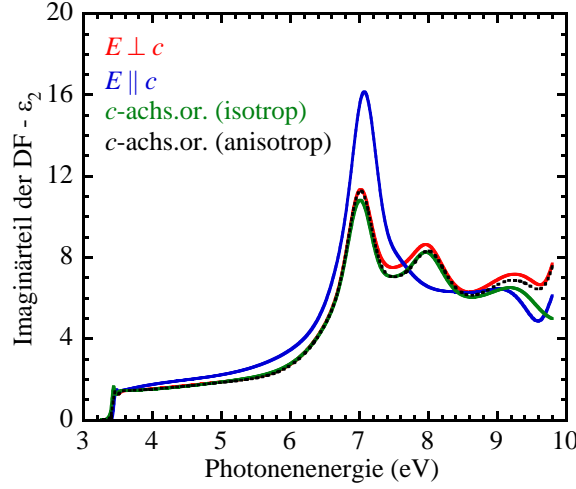


Abbildung 6.29: Imaginärteil der ordentlichen (rot) und außerordentlichen DF (blau) von Probe MD3, verglichen mit dem isotropen Modell von Probe BS1 (grün) und einer anisotrop berechneten Pseudo-DF für halbbunendliches c -achsenorientiertes GaN (schwarz gepunktet).

6.3 Dielektrische Funktion von AlN($11\bar{2}0$)

Mit einer ähnlichen Vorgehensweise wie sie im vorangegangenen Abschnitt zur Bestimmung der anisotropen DF von GaN führte, sollen nun auch a -achsenorientierte AlN-Proben untersucht werden.

Abbildung 6.30 zeigt den Real- und den Imaginärteil der Pseudo-DF von Probe M1 für die Orientierungen mit der c -Achse senkrecht und parallel zur Einfallsebene. Die Anisotropie der optischen Eigenschaften ist im Diagramm klar erkennbar. Die blaue Kurve für $\langle \varepsilon_2 \rangle$, welche durch die außerordentliche DF dominiert ist, hat bei 7,8 eV eine deutlich höhere Amplitude im Vergleich zum ordentlichen, rot dargestellten Spektrum. Dieser Sachverhalt konnte bereits für GaN beobachtet werden. Ebenso ist $\langle \varepsilon_1 \rangle$ mit der c -Achse parallel zur Einfallsebene energetisch unterhalb stets größer als für den senkrechten Fall. Dies gilt auch im transparenten Gebiet für den Mittelwert der Oszillationen.

Um den Bereich der Bandkante näher zu beleuchten, wurde dieser in Abbildung 6.31 vergrößert dargestellt. Der Graph zeigt neben den Raumtemperaturmessungen auch die Daten für $T = 160\text{K}$, bei denen die optischen Übergänge durch die geringere Verbreiterung deutlicher hervortreten. Oberhalb des transparenten Bereiches, der durch Schichtdickeninterferenzen gekennzeichnet ist, befindet sich bei allen Spektren die jeweilige Absorptionskante. Diese ist für die senkrechte Orientierung (rote Kurven) durch das freie A- und

6.3. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON ALN(11 $\bar{2}$ 0)

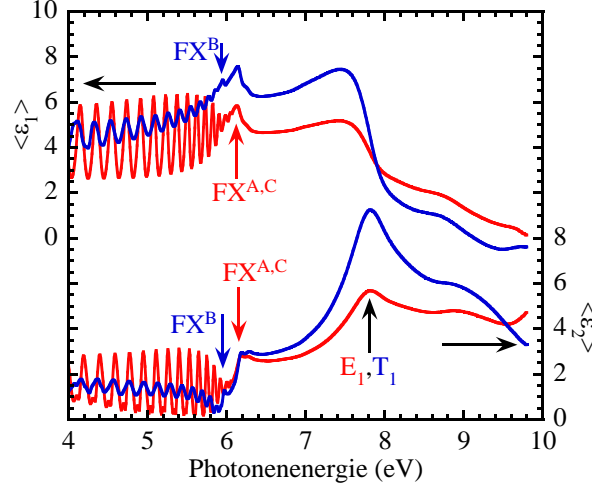


Abbildung 6.30: Anisotroper Real- und Imaginärteil der Pseudo-DF von Probe M1 bei $\theta_i = 68^\circ$ für c -Achse senkrecht (rot) und parallel zur Einfallsebene (blau). Optische Übergänge mit Pfeilen gekennzeichnet.

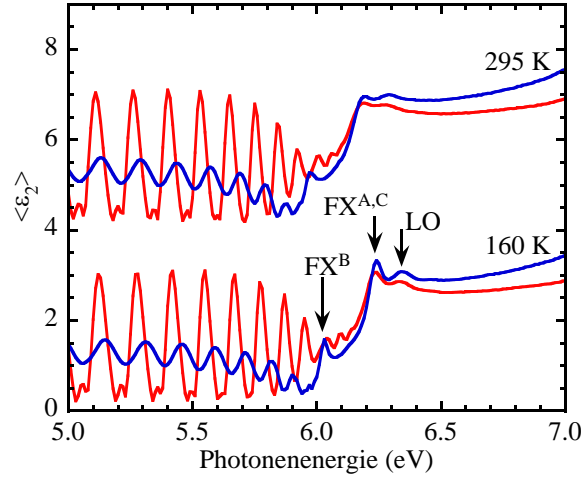


Abbildung 6.31: Anisotroper Imaginärteil der Pseudo-DF von Probe M1 im Bereich der Bandkante bei $\theta_i = 68^\circ$ für RT und $T = 160$ K. Orientierung der c -Achse senkrecht (rot) und parallel zur Einfallsebene (blau). Optische Übergänge mit Pfeilen gekennzeichnet. RT-Messungen um +4 verschoben.

C-Exziton bestimmt. Die beiden exzitonischen Übergänge konnten bei den Messungen nicht getrennt aufgelöst werden. Bei Raumtemperatur liegen sie bei $\sim 6,16$ eV, bei 160 K bei 6,22 eV. Etwa 110 meV oberhalb befindet sich eine weitere Erhöhung in $\langle \epsilon_2 \rangle$. Hierbei handelt es sich um eine Phononreplik. Bei der Anregung des Exzitons wird gleichzeitig ein

longitudinales optisches Phonon erzeugt, dessen Energie 113 meV beträgt [131]. Ist die c -Achse parallel zur Einfallsebene ausgerichtet, wobei die außerordentliche DF dominiert, so wird bereits bei 5,96 eV (Raumtemperatur) bzw. 6,01 eV (160K) ein exzitonisches Signal detektiert, welches FX^{B} zuzuordnen ist. Die Reihenfolge der Bänder ist damit im Vergleich zu GaN vertauscht, so daß nun der B-Übergang der energetisch niedrigste ist. Dieses Verhalten wurde in Abbildung 2.2 vorhergesagt und findet hier die experimentelle Bestätigung. Die gezeigten Spektren weisen aber auch einige Besonderheiten auf. Setzt man unverspanntes Material voraus, sollten in der ordentlichen DF nur FX^{A} und FX^{C} sichtbar sein, während man in der außerordentlichen DF nur FX^{B} beobachtet. Im Experiment sind aber in der parallelen Orientierung sämtliche Exzitonen auszumachen. Auf der anderen Seite sind bei senkrechter Ausrichtung der c -Achse die Interferenzoszillationen bereits ab der Energieposition von FX^{B} nahezu ausgelöscht. Eine mögliche Erklärung ist der unbekannte Verspannungszustand der Probe. Für GaN wurde bereits gezeigt, daß dieser die relativen Oszillatorstärken beeinflussen kann. Allerdings ist davon auszugehen, daß bei AlN die Verspannung gegenüber dem großen Betrag von Δ_{cr} zu vernachlässigen ist. Es ist auch denkbar, daß die Informationen der Probenzüchter über die Orientierung der c -Achse nicht die erforderliche Genauigkeit besitzen. Somit kann die exakte Orientierung der Probe während der Messung nicht gewährleistet werden, wodurch möglicherweise beide Komponenten der DF signifikant zum Signal beitragen. Das kann unter Umständen auch die ungewöhnlich geringe Amplitude der Interferenzoszillationen für die (nominell) parallele Orientierung der c -Achse zur Einfallsebene erklären. Aufgrund der vorliegenden Unsicherheiten ist es leider nicht möglich, die anisotrope DF von AlN zu bestimmen und es kann nur die pseudodielektrische Funktion angegeben werden.

Zusätzlich zu Probe M1 wurde auch Probe MD4 untersucht. Ihre orientierungsabhängige Pseudo-DF ist in Abbildung 6.32 dargestellt. Auch diese Probe besitzt anisotrope optische Eigenschaften. Die Interferenzoszillationen erscheinen für beide Probenorientierungen sehr stark gedämpft. Energetisch darüber zeigt sich jeweils eine Absorptionskante, die besonders markant ausgeprägt ist, wenn die c -Achse parallel zur Einfallsebene liegt. Im Gegensatz zu Probe M1 ist hier in der senkrechten Orientierung nur der Beitrag von FX^{A} und FX^{C} zu sehen, während für die c -Achse in der Einfallsebene ausschließlich FX^{B} detektiert wird. Für Probe MD4 bestätigt sich somit die Vorhersage über die Verteilung der Oszillatorstärken und es erhärtet sich der Verdacht, daß bei Probe M1 die nominelle Orientierung der c -Achse nicht mit der tatsächlichen übereinstimmt. Im hochenergetischen Bereich ist für die parallele Orientierung ein Maximum zu verzeichnen, welches dem T_1 -Übergang zuzuordnen ist. Bei senkrechter Ausrichtung beobachtet man hingegen zwei schwache Strukturen von E_1 und E_2 . Insgesamt sind die Amplituden für

6.3. DIELEKTRISCHE FUNKTION VON ALN(11 $\bar{2}$ 0)

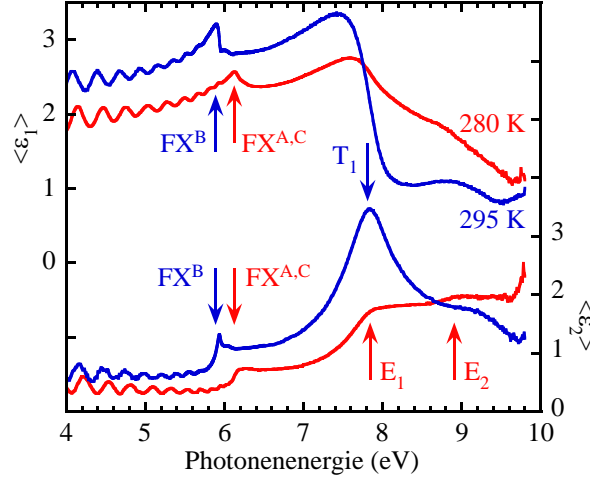


Abbildung 6.32: Anisotroper Real- und Imaginärteil der Pseudo-DF von Probe MD4 bei $\theta_i = 68^\circ$ für c -Achse senkrecht (rot) und parallel zur Einfallsebene (blau). Optische Übergänge mit Pfeilen gekennzeichnet.

beide Richtungen mit Werten von unter 4 für $\langle \epsilon_2 \rangle$ äußerst gering. Üblicherweise tritt ein solches Verhalten bei einer größeren Oberflächenrauigkeit bzw. Oxidschicht an der Oberfläche auf. Schaut man sich andererseits die Werte von $\langle \epsilon_1 \rangle$ für $\hbar\omega \rightarrow 0$ an, so streben sie gegen 2 bzw. 2,5. Typischerweise erwartet man hier aber Werte zwischen 5 und 5,5. In diesem Spektralbereich ist der Einfluß einer Oberflächenrauheit nur gering und kann nicht für solche Abweichungen verantwortlich sein. Daher sind die guten Eigenschaften der Schicht selbst in Frage zu stellen. Auf dieser Datenbasis gelingt es nicht, die DF von ALN mit einem Modell anzupassen.

Dennoch erscheint es lohnenswert, auch für diese Probe den bandkantennahen Bereich näher zu beleuchten. Für diesen Zweck wurde jener Teil der Spektren in Abbildung 6.33 vergrößert und zusätzlich mit den Messungen bei $T = 10$ K verglichen. In allen Spektren wird eine Absorptionskante beobachtet. Der exzitronische Charakter wird insbesondere bei der parallelen Ausrichtung der c -Achse ersichtlich, bei der er sich in einer klaren Überhöhung von $\langle \epsilon_2 \rangle$ zeigt. Die Übergangsenergien für FX^A und FX^B bei Raumtemperatur liegen bei 6,16 eV und 5,94 eV. Da bei $T = 10$ K die thermische Verbreiterung nicht zum Tragen kommt, findet man hier eine sehr viel schmalere Linienform, was eine Abschätzung der Übergangsenergien erleichtert. Bei tiefen Temperaturen liegen die Signale um ca. 70 meV höher bei 6,23 eV für FX^A und 6,02 eV für FX^B . Die Aufspaltung der Bänder beträgt damit etwa 215 meV, was einem Δ_{cr} von -220 meV entspricht. Das Ergebnis liegt nahe an dem angenommenen Wert von -230 meV aus Tabelle 2.2.

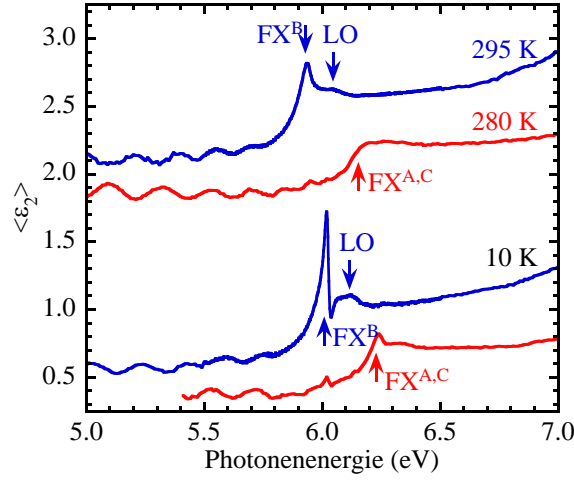


Abbildung 6.33: Anisotroper Imaginärteil der Pseudo-DF von Probe MD4 im Bereich der Bandkante bei $\theta_i = 68^\circ$ für RT und $T = 10$ K. Orientierung der c -Achse senkrecht (rot) und parallel zur Einfallsebene (blau). Optische Übergänge mit Pfeilen gekennzeichnet. RT-Messungen um +1,5 verschoben.

Detailliertere Angaben setzen die genaue Kenntnis des Verspannungszustandes der Probe voraus, da sich Kompression und Dehnung in ähnlicher Weise wie eine Verschiebung von Δ_{cr} bemerkbar machen. Auch ist eine genauere Bestimmung der Übergangsenergien wünschenswert. Leider fehlt es an einer geeigneten Anregungsquelle, um in diesem Spektralbereich Modulationsspektroskopie betreiben zu können.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß es für die untersuchten AlN-Proben möglich war, die optische Anisotropie nachzuweisen. Das Verhalten im hochenergetischen Bereich ist ähnlich wie bei GaN. Im transparenten Spektralbereich sollte auch hier $\varepsilon_{1\parallel}$ größer sein als $\varepsilon_{1\perp}$. An der Bandkante findet die vorhergesagte Vertauschung der obersten Valenzbänder statt. Der stark negative Wert der Kristallfeldaufspaltung von -230 meV wurde näherungsweise bestätigt. Die erlangten Meßdaten gestatten allerdings keine quantitative Bestimmung der ordentlichen und außerordentlichen Komponente der DF.

Kapitel 7

Experimentelle Ergebnisse - Heterostrukturen

Die Charakteristik von Bauelementen, die auf AlGa_N/Ga_N-Heterostrukturen basieren, hängt in hohem Maße von der Polarisierung ab. Während die spontane Polarisierung ausschließlich durch den jeweiligen Al-Gehalt gegeben ist, ist die piezoelektrische Polarisierung durch die Verspannung der einzelnen Schichten bestimmt. Beide können starke interne elektrische Felder verursachen, deren Betrag leicht mehrere MV/cm erreichen kann. Die elektrischen Felder für Proben mit einer freien Oberfläche lassen sich durch Photo-reflexionsuntersuchungen ermitteln, während die Bestimmung unterhalb eines Schottky-Kontaktes mittels Elektroreflexion erfolgen kann. Für das Verständnis der experimentellen Ergebnisse und die Voraussage der Eigenschaften von Schichtstrukturen müssen diese modelliert werden. Dazu ist die genaue Kenntnis des Probenaufbaus und insbesondere der Dicken der aktiven Schichten von großer Bedeutung. Ein wichtiges Werkzeug hierfür ist die Spektralellipsometrie. Aussagen zum Al-Gehalt sind mit den vorgestellten Methoden ebenfalls möglich. Die Erkenntnisse des vorangegangenen Kapitels sind somit unumgängliche Voraussetzung und bieten das Rüstzeug für die umfassende optische Charakterisierung von Heterostrukturen, bestehend aus Nitridhalbleitern.

7.1 AlGa_N/Ga_N-Heterostrukturen

Den einfachsten Fall einer Heterostruktur stellt eine dünne AlGa_N-Schicht auf einem dicken Ga_N-Puffer dar. Wie in Kapitel 3.3 beschrieben, kommt es im Ga_N nahe der Grenzfläche zur Ausbildung eines 2DEG. Dessen hohe Elektronenbeweglichkeit ermöglicht die Anwendung als HEMT. Die Flächenladungsdichte des 2DEG hängt dabei empfindlich von der Probenoberfläche ab. Setzt man diese Ionen bzw. Gasen oder Flüssigkeiten,

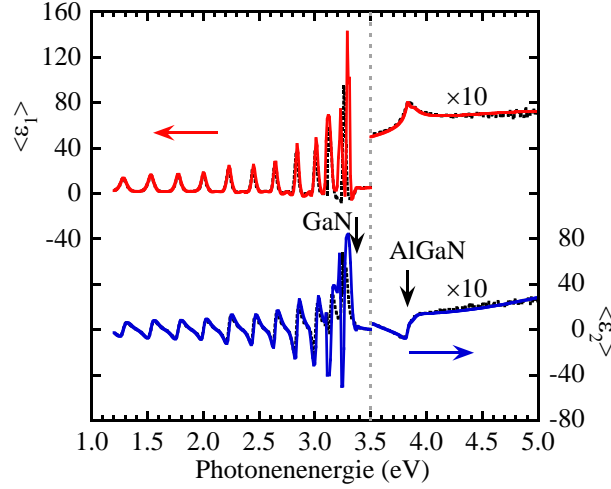


Abbildung 7.1: Experimentelle Daten (schwarz) und Modellanpassung (farbig) der pseudodielektrischen Funktion von Probe MD5 bei $\theta_i = 70^\circ$. Bereich oberhalb von 3,5 eV mit Faktor 10 multipliziert. FX^A von GaN und AlGaIn mit Pfeilen gekennzeichnet.

deren Moleküle ein Dipolmoment besitzen, aus, so ist sehr rasch eine Änderung der Ladungsträgerkonzentration feststellbar [108, 132, 133]. Dieser Effekt wird in zahlreichen Sensoranwendungen ausgenutzt. Es handelt sich in diesem Fall um einen Transistor, dessen Gate durch die freie Oberfläche oder einen veränderlichen Schottkykontakt gebildet wird. Statt der Gatespannung wird dann das OF-Potential (oder die Schottkybarriere) durch die zu detektierenden Umwelteinflüsse modifiziert, woraufhin es zu einer Änderung des Source-Drain-Stromes kommt.

Um das Verhalten von AlGaIn/GaN-Heterostrukturen näher zu beleuchten und eine geeignete Dimensionierung für verschiedene Anwendungsbereiche zu ermöglichen, können optische Untersuchungen einen wichtigen Beitrag leisten. Dies wird im Folgenden anhand von Probe MD5 demonstriert. Das Verhalten von Nitridhalbleiterheterostrukturen wird maßgeblich durch die Dicken der Schichten im aktiven Bereich bestimmt. Daher ist es für eine umfassende Charakterisierung unerlässlich, jene mit möglichst hoher Genauigkeit zu ermitteln. Zu diesem Zweck wurden SE-Messungen bei vier verschiedenen Einfallswinkeln ($\theta_i = 60^\circ, 65^\circ, 70^\circ, 75^\circ$) durchgeführt. Abbildung 7.1 zeigt die Pseudo-DF für $\theta_i = 70^\circ$. Im niederenergetischen Bereich sind Schichtdickeninterferenzen zu sehen. Ihre Höhe ist deutlich größer als bei vergleichbaren Messungen in Kapitel 6. Dieses Phänomen ist auf den hohen Brechungsindex des Si-Substrates im Vergleich zu Saphir oder SiC zurückzuführen. Bei 3,44 eV verschwinden die Oszillationen und markieren damit die

7.1. ALGAN/GAN-HETEROSTRUKTUREN

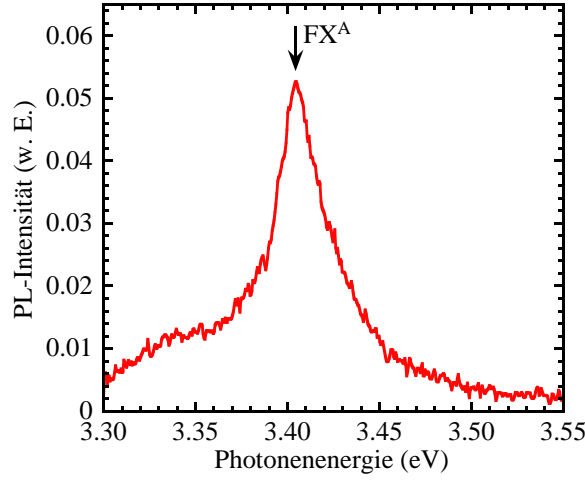


Abbildung 7.2: PL-Spektrum von Probe MD5 bei RT. Energieposition des A-Exzitons mit Pfeil gekennzeichnet.

Absorptionskante des GaN. Bei 3,83 eV ist eine zweite Absorptionskante zu detektieren, welche vom AlGaN stammt und zur besseren Darstellung im Diagramm vergrößert wurde. Die experimentellen Daten (schwarz) wurden mit einem Vielschichtmodell angepaßt (farbige Kurven), welches in der Lage ist, alle spektralen Besonderheiten zu reproduzieren. Die geringfügigen Abweichungen kurz unterhalb des Bandabstandes von GaN sind Schichtdickeninhomogenitäten des dicken GaN-Puffers geschuldet. Da der Brechungsindex in diesem Bereich stark ansteigt, macht sich die Inhomogenität hier in einer größeren Änderung der Phasendicke bemerkbar. Aus dem Modell lassen sich die Schichtdicken in Abbildung 5.3 entnehmen. Die OF-Rauhigkeit der Probe beträgt 2,4 nm.

Nachdem der Probenaufbau verifiziert wurde, ist der für die piezoelektrische Polarisation wichtige Verspannungszustand der Probe zu bestimmen. Eine geeignete Methode ist die PL, welche im Vergleich zur SE eine erheblich größere Genauigkeit ermöglicht. Das bei Raumtemperatur aufgenommene Spektrum ist in Abbildung 7.2 gezeigt. Das einzelne Maximum bei 3,405 eV ist dem freien A-Exziton zuzuschreiben. Aufgrund der thermischen Verbreiterung ist FX^{B} nicht getrennt aufzulösen. Beachtet man die Exziton-bindungsenergie von 24 meV, so ergibt sich eine Bandlücke von 3,429 eV. Verglichen mit dem unverspannten Wert von 3,436 eV aus Abbildung 6.5 läßt sich eine geringfügig tensile Verspannung von $\epsilon_{xx} = 8,56 \times 10^{-4}$ ableiten. Unter der Voraussetzung eines pseudomorphen Wachstums des $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}$ -Films auf dem GaN-Kanal ist das AlGaN dann stärker tensil verspannt ($\epsilon_{xx} = 5,62 \times 10^{-3}$).

In Bezug auf die Entwicklung von Bauelementen ist der elektrischen Feldstärke in der

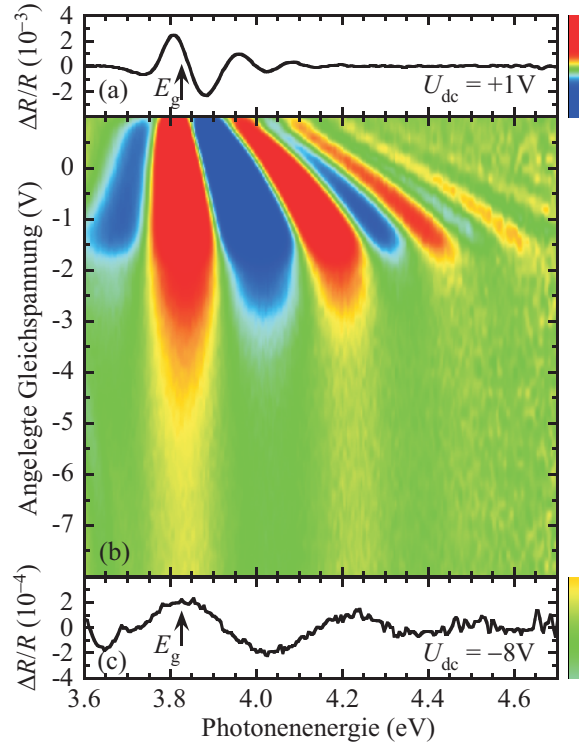


Abbildung 7.3: ER-Spektren des AlGaIn-Bereiches von Probe MD5. a) ER-Spektrum bei $U_{dc} = +1$ V, b) farbkodierte Spannungskarte der ER-Spektren und c) ER-Spektrum bei $U_{dc} = -8$ V. Bandlücke mit Pfeilen gekennzeichnet.

AlGaIn-Barriere große Bedeutung zuzuschreiben. Das optimale Verfahren zur Ermittlung dieser wichtigen Größe ist die Elektrophotoreflexion, da sie es ermöglicht, das OF-Potential durch Anlegen einer Gleichspannung über einen weiten Bereich durchzustimmen. Abbildung 7.3a) zeigt das ER-Spektrum bei $U_{dc} = 1$ V. Die Struktur des Hauptmaximums bei ca. 3,8 eV ist exzitoner Natur. Die zugehörige Bandlücke liegt bei 3,826 eV. Daran anschließend sind mehrere Franz-Keldysh-Oszillationen zu beobachten, deren Amplitude rasch abnimmt. Ihre Periode ist ein Maß für die elektrische Feldstärke der Schicht. Vergleicht man das Spektrum mit dem für $U_{dc} = -8$ V in Abbildung 7.3c), läßt sich erkennen, daß die Weite der FKO und damit auch die Feldstärke bei negativen Spannungen stark zunimmt. Zudem beträgt die Signalamplitude nur noch ein Zehntel. Die komplette Spannungsabhängigkeit ist in farbkodierter Form in Abbildung 7.3b) illustriert. Beginnend bei positiven Spannungen laufen die Oszillationen bis $-1,8$ V kontinuierlich auseinander. Ab diesem Punkt verändert sich die Periode nur noch unwesentlich. Gleichzeitig wird unterhalb dieser Spannung die Amplitude der Spektren stark reduziert.

Die Linienformanalyse der Spektren ermöglicht die spannungsabhängige Ermittlung

7.1. ALGAN/GAN-HETEROSTRUKTUREN

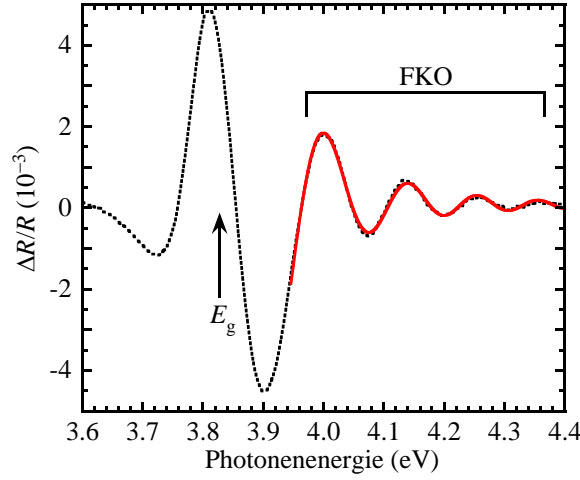


Abbildung 7.4: Experimentelle Daten (schwarz gestrichelt) und Linienformanpassung (rot durchgezogen) des ER-Spektrums von Probe MD5 bei $U_{dc} = 0,6$ V. Bandlücke und Bereich der FKO gekennzeichnet.

der elektrischen Feldstärke. Abbildung 7.4 zeigt die Anpassung nach Gleichung (4.58) am Beispiel von $U_{dc} = 0,6$ V. Zu beachten ist, daß in der verwendeten Gleichung keine exzitonischen Effekte berücksichtigt werden. Auch handelt es sich um eine asymptotische Näherung, welche erst deutlich oberhalb der Bandlücke Gültigkeit besitzt, was den möglichen Bereich der Linienformanpassung einschränkt. Die Abbildung demonstriert die Qualität, mit der die experimentellen Daten wiedergegeben werden, was eine genaue Bestimmung der elektrischen Feldstärke ermöglicht. Im angegebenen Beispiel beträgt sie -532 kV/cm. Die Abhängigkeit von der angelegten Gleichspannung ist in Abbildung 7.5 zusammengefaßt. Wie bereits angedeutet lassen sich zwei Bereiche unterscheiden. Oberhalb von $-1,8$ V ändert sich F_b sehr stark mit der angelegten Spannung, wobei das Verhalten nahezu linear ist. Über einen Bereich von 2 V ändert sich F_b um ca. 770 kV/cm. Dies bedeutet, daß bei der vorgegebenen Schichtdicke von $d_b = 22$ nm etwa $1,7$ V über der AlGaN-Barriere abfallen, was 85% der angelegten Spannung entspricht. Die fehlenden 15% entfallen demzufolge auf den GaN-Kanal direkt unterhalb der Barriere sowie auf ohmsche Verluste an den Zuleitungen und den Kontakten. Bei $-1,8$ V knickt die $F_b(U_{dc})$ -Charakteristik allmählich ab. Die zugehörige Feldstärke von -1453 kV/cm wird als Schwellfeldstärke F_{th} bezeichnet. Bei negativeren Spannungen ändert sich F_b nur noch sehr wenig. Offenbar fällt die Spannung hier über einem wesentlich größeren Teil der Probe ab und nicht mehr nur über der Barriere. Die stärkere Streuung der Werte ist dem sinkenden Signal-Rausch-Verhältnis in diesem Spannungsbereich geschuldet.

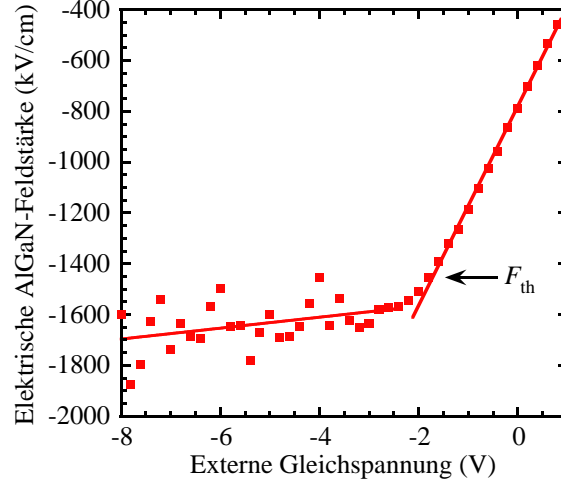


Abbildung 7.5: Elektrische Feldstärke der AlGaN-Barriere in Abhängigkeit der extern angelegten Gleichspannung. Linien als optische Hilfe. Schwellfeldstärke mit Pfeil gekennzeichnet.

Um das Verhalten der Probe zu erklären, wurden Berechnungen angestellt, die auf dem iterativen Lösen der Schrödinger- und der Poissongleichung basieren. Auf diese Weise lassen sich der Bandkantenverlauf, die Energieniveaus des 2DEG sowie die Ladungsträgerdichte in Abhängigkeit von der Tiefe ermitteln. Es wurde sich auf ein einzelnes Leitungsband beschränkt. Die Werte für die Leitungsbanddiskontinuität schwanken sehr in der Literatur. In älteren experimentellen [134,135] und theoretischen Arbeiten [136,137] werden häufig 70% der Bandlückendifferenz berichtet. Inzwischen wird für pseudomorph abgeschiedene Schichten eher von 61–63% ausgegangen [138,139]. In dieser Arbeit wurde ein mittlerer Wert von 65% verwendet [140]. Die effektiven Massen von GaN (AlN) wurden aus den A-Parametern [75] zu $m_e = 0,22$ ($0,33$) m_0 bzw. $m_{hh} = 1,887$ ($3,571$) m_0 berechnet und für AlGaN linear interpoliert. Die Verspannung läßt sich aus dem PL-Experiment ableiten, womit auch die piezoelektrische Polarisierung gegeben ist. Die Gesamtpolarisationsladungen im GaN (AlGaN) betragen dann $-2,1710 \times 10^{13}$ ($-3,0137 \times 10^{13}$) e/cm^2 . Die relative statische Dielektrizitätskonstante wurde zwischen 10,4 für GaN [141] und 8,5 für AlN [70] interpoliert. Die Schottkybarriere wurde variiert, um die experimentell bestimmte AlGaN-Feldstärke zu reproduzieren. Die resultierenden Leitungsbandkanten sind in Abbildung 7.6 bezogen auf die Fermienergie aufgetragen. Die Rechnung wurde für verschiedene angelegte Gleichspannungen wiederholt. Für $U_{dc} > -1,8$ V existiert an der AlGaN/GaN-GF ein Elektronengas. Dieses hält die Fermienergie nahe der Leitungsbandkante des AlGaN fest. Beispielsweise wirkt sich eine Veränderung der Spannung an der

7.1. ALGAN/GAN-HETEROOSTRUKTUREN

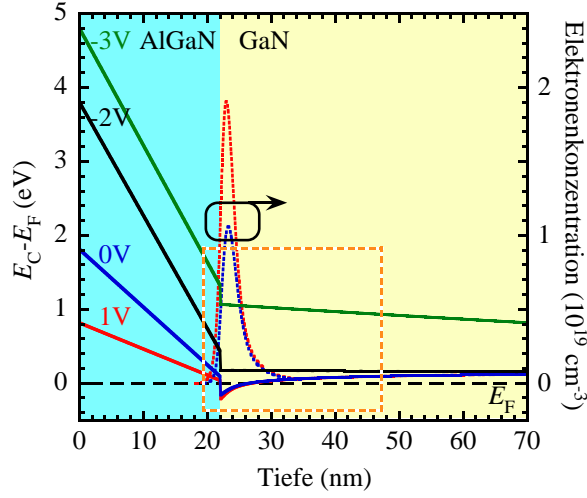


Abbildung 7.6: Auf die Fermienergie bezogene Leitungsbandkante von Probe MD5 für verschiedene angelegte Gleichspannungen mit zugehöriger ortsabhängiger Elektronenkonzentration.

Oberfläche von 1 V auf 0 V kaum auf die Grenzfläche aus. Hier verschiebt sich die Leitungsbandkante nur um 57 meV. Allerdings werden gleichzeitig die Elektronen von der GF weggedrängt und die Flächenladungsdichte sinkt um ca. ein Drittel. Dieser Umstand wird in der Ladungsträgerverteilung in Abbildung 7.6 ersichtlich. Bei $U_{dc} = -2$ V ist das 2DEG vollständig verarmt und der Flachbandfall für den GaN-Kanal ist bereits überschritten. Ab dem Erreichen der Schwellfeldstärke ist die Fermienergie nicht mehr nahe der Leitungsbandkante festgehalten und eine steigende negative Spannung führt zu einer schnellen Ausweitung der Raumladungszone. Aufgrund dieser Tatsache ändert sich F_b dann nur noch geringfügig. Dies impliziert, daß lediglich eine schwache Modulation durch U_{ac} stattfinden kann, wodurch die ER-Amplitude schlagartig zurückgeht.

Nachdem der Verlauf der $F_b(U)$ -Charakteristik geklärt ist, wird im Folgenden auf die Bedeutung dieser Größe eingegangen. Nach dem Gaußschen Satz ist das Oberflächenintegral der elektrischen Flußdichte gleich der Summe der im umschlossenen Volumen befindlichen Ladungen. Es wird der orange umrandete Bereich in Abbildung 7.6 betrachtet. Da die Feldstärke nur eine Komponente in z -Richtung hat, vereinfacht sich die Integration zur Summation über die Feldstärke in GaN und AlGaN, mit der jeweiligen statischen Dielektrizitätskonstante multipliziert. Fernab der GF ist die Feldstärke im GaN-Kanal Null. An dem Punkt der Schwellfeldstärke im AlGaN ist gerade noch kein 2DEG vorhanden, so daß unter Vernachlässigung der Hintergrunddotierung die einzigen Ladungen an der GF

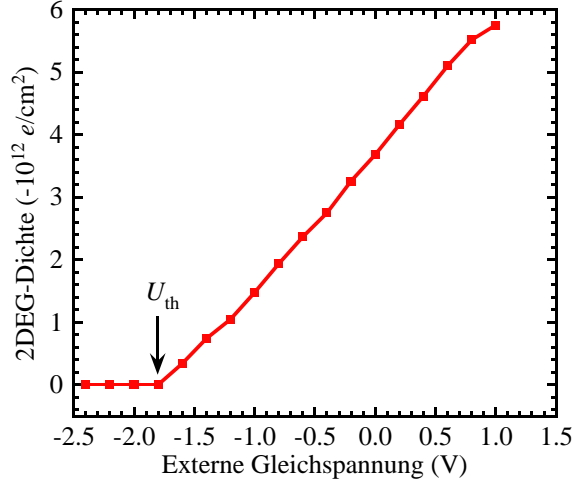


Abbildung 7.7: Flächenladungsdichte des 2DEG von Probe MD5 in Abhängigkeit von U_{dc} .

die Polarisationsladungen sind. Somit besteht der Zusammenhang

$$\varepsilon_0 \varepsilon_{r, \text{AlGaIn}} F_{th} = \Delta P. \quad (7.1)$$

Für die ermittelte Schwellfeldstärke von -1453 kV/cm erhält man einen Polarisationsgradienten von $-8,05 \times 10^{12} \frac{e}{\text{cm}^2}$. Bedenkt man die Unsicherheit von 5-10% in der Bestimmung von F_b , so liegt dieser Wert sehr nah bei dem aus P^{SP} und P^{PZ} von GaN und AlGaIn theoretisch berechneten Gradienten von $-8,43 \times 10^{12} \frac{e}{\text{cm}^2}$. Wird U_{dc} erhöht, dann wächst ab der Schwellfeldstärke die Flächenladungsdichte des 2DEG. Ähnlich zu Gleichung (7.1) gilt dann

$$\varepsilon_0 \varepsilon_{r, \text{AlGaIn}} F_b = \Delta P - e N_{2DEG}. \quad (7.2)$$

Da der Polarisationsgradient konstant bleibt, läßt sich die Ladungsträgerdichte auch mit der Feldstärkeänderung ΔF_b in Relation bringen:

$$N_{2DEG} = - \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{r, \text{AlGaIn}} (F_b(U) - F_{th})}{e}. \quad (7.3)$$

Das Ergebnis dieser Umrechnung findet sich in Abbildung 7.7. Unterhalb der Schwellspannung ist das 2DEG vollständig verarmt. Oberhalb von -1,8 V steigt die Flächenladungsdichte kontinuierlich an. Die Genauigkeit dieses Vorgehens wurde durch Vergleiche mit Shubnikov-de-Haas-Messungen demonstriert [142]. Damit ist gezeigt, daß es möglich ist, die 2DEG-Konzentration einer AlGaIn/GaN-Heterostruktur allein mit optischen Methoden zu bestimmen.

Die Flächenladungsdichte hängt offenbar empfindlich vom Abstand der Leitungsbandkante an der OF zum Fermi-niveau ab. Die Pt/AlGaIn-Schottkybarriere wurde durch die

7.1. ALGAN/GAN-HETEROSTRUKTUREN

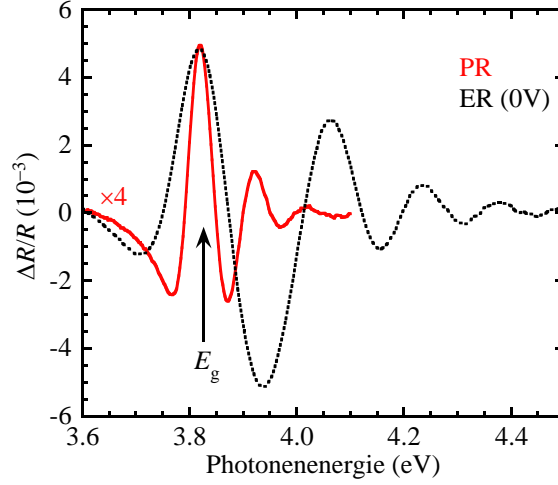


Abbildung 7.8: Vergleich von PR- und ER-Spektrum bei $U_{dc} = 0$ von Probe MD5. AlGaN-Bandlücke mit Pfeil gekennzeichnet. Normierungsfaktor im Diagramm angegeben.

ER-Daten und selbstkonsistenten Rechnungen auf 1,82 V festgelegt. Für Sensoranwendungen ist allerdings eher das OF-Potential der freien Oberfläche entscheidend. Beide Größen sind streng zu unterscheiden. Statt der ER-Messungen wird bei der freien OF auf die Photoreflexion zurückgegriffen. Abbildung 7.8 vergleicht die PR-Messung mit dem ER-Spektrum bei $U_{dc} = 0$. Während die Energieposition des exzitonischen Übergangs bzw. der Bandlücke unverändert bleibt, liegen die Franz-Keldysh-Oszillationen bei der PR sehr viel enger beisammen als beim ebenfalls spannungslosen ER-Spektrum. Die elektrische Feldstärke in der AlGaN-Barriere beträgt nur -304 kV/cm für die freie OF im Gegensatz zu -788 kV/cm unterhalb des Schottky-Kontaktes. Die Flächenladungsdichte des 2DEG beträgt damit $-6,4 \times 10^{12} \text{ e/cm}^2$ und ist deutlich höher als unter dem Kontakt. Allein das Aufbringen eines Schottkykontaktes auf eine AlGaN/GaN-Heterostruktur führt also bereits zu einer teilweisen Verarmung des Elektronengases. Die selbstkonsistente Rechnung ergibt ein Oberflächenpotential von $0,71$ eV, welches etwas höher ist als bei früheren Untersuchungen an Heterostrukturen mit geringerem Al-Anteil [133, 143] und zeigt, daß das OF-Potential von GaN zu AlN allmählich ansteigt.

Bei bekannter AlGaN-Feldstärke und Polarisierung läßt sich die Zahl der geladenen OF-Zustände durch die Anwendung des Gaußschen Satzes auf die Grenzfläche zwischen Luft und AlGaN mit

$$\sigma_{ss} = \varepsilon_0 \varepsilon_{r, \text{AlGaN}} F_b - \sigma_{P, \text{AlGaN}} \quad (7.4)$$

abschätzen. Für die untersuchte Probe erhält man einen Wert von $\sigma_{ss} = +28,45 \times$

10^{12} e/cm^2 . Zu beachten ist, daß es sich hierbei um eine Nettoladung handelt, welche die Summe aus Oberflächendonator- und evtl. ebenfalls vorhandenen OF-Akzeptorladungen darstellt.

Zusammengefaßt läßt sich sagen, daß es durch die Kombination verschiedener optischer Methoden gelingt, AlGaIn/GaN-Heterostrukturen umfassend zu charakterisieren. Die SE ermöglicht Aussagen über die Dicke der Filme, deren Verspannungszustand mit PL bestimmt wird, während sich aus ER- und PR-Messungen die elektrische Feldstärke der Barriere extrahieren läßt. Mit diesen Daten werden Flächenladungsdichten des 2DEG, Polarisationsgradienten, Schottkybarrieren, Oberflächenpotentiale und die Dichte der Oberflächenladungen berechnet.

7.2 GaN/AlGaIn/GaN-Heterostrukturen

Häufig bestehen Bauelemente nicht nur aus einem GaN-Kanal und einer AlGaIn-Barriere. Vielmehr werden derlei Strukturen oftmals noch mit einer GaN-Deckschicht versehen. Ein Grund ist die höhere chemische Stabilität der GaN-Oberfläche im Gegensatz zu AlGaIn, welches leichter oxidiert. Der zusätzliche GaN-Film modifiziert außerdem den Bandkantenverlauf, wodurch die Elektronengasdichten reduziert werden können, ohne den übrigen Probenaufbau zu verändern. Dies mag für hochsensitive Sensoren oder bestimmte Transistoranwendungen wünschenswert sein.

Wie sich noch zeigen wird, ist bezüglich der Eigenschaften grundsätzlich zwischen Proben mit dünnen und dicken Deckschichten ($d_c \gtrsim 10 \text{ nm}$) zu unterscheiden.

7.2.1 Heterostrukturen mit dünner GaN-Deckschicht

Bei den Proben mit dünner Deckschicht wurden neun Proben untersucht. Der sehr ähnliche Aufbau und die nahezu identischen Wachstumsbedingungen gewährleisteten ihre Vergleichbarkeit. Sie unterscheiden sich hauptsächlich in der Dicke d_c des abschließenden GaN-Films sowie im Al-Gehalt der Barriere. Eine Besonderheit bildet Probe FR1, welche keine Deckschicht besitzt und somit als einfache AlGaIn/GaN-Heterostruktur eine Referenz darstellt.

Da die Bandkantenverläufe entscheidend von den Schichtdicken abhängen, sind diese mit möglichst hoher Genauigkeit zu bestimmen und wurden dementsprechend mit hochauflösender Röntgenbeugung sowie spektroskopischer Ellipsometrie unter mehreren Einfallswinkeln verifiziert. Die pseudodielektrische Funktion (Meßdaten von M. Baeumler) von Probe FR6 bei $\theta_i = 70^\circ$ ist in Abbildung 7.9 als Beispiel aufgeführt. Wie bereits in

7.2. GAN/ALGAN/GAN-HETEROSTRUKTUREN

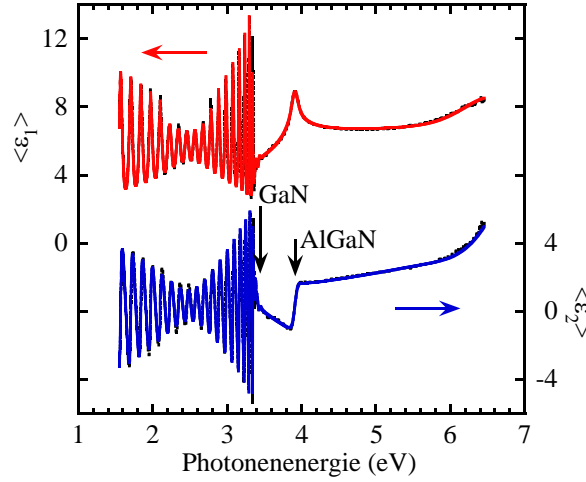


Abbildung 7.9: Experimentelle Daten (schwarz gepunktet) und Modellanpassung (farbig durchgezogen) der pseudodielektrischen Funktion von Probe FR6 bei $\theta_i = 70^\circ$.

früheren Kapiteln erläutert, markiert das Ende der Schichtdickeninterferenzen knapp unterhalb von 3,44 eV die Absorptionskante des GaN. Die des AlGaN ist deutlich bei 3,9 eV zu erkennen. Die Anpassung der experimentellen Daten (schwarz) erfolgt mit einem Vielschichtmodell, welches den Aufbau aus Abbildung 5.4 beinhaltet und zusätzlich GF- und OF-Rauhigkeiten berücksichtigt. Das Ergebnis wird durch die farbigen Kurven in Abbildung 7.9 repräsentiert. Die gute Übereinstimmung mit dem Experiment ermöglicht es, aus dem Modell die Schichtdicken zu extrahieren, welche in Tabelle 5.3 aufgeführt sind.

Nachdem d_b und d_c nun bekannt sind, können mittels Photoreflexion die AlGaN-Bandlücke, der Al-Gehalt und F_b bestimmt werden. Die jeweiligen Spektren werden in Abbildung 7.10 verglichen. Das Signal des GaN ist nahezu identisch für alle Proben. Lediglich die Amplitude ist verschieden. Der Übergang des A-Exzitons ist durch eine gestrichelte Linie gekennzeichnet und liegt bei 3,416 eV. Das GaN kann demnach als unverspannt angesehen werden (vergleiche Abbildung 6.5). Die Signale zwischen 3,6 und 4,0 eV rühren von den AlGaN-Barrieren her. Deren Bandlücken variieren sehr stark und lassen unter Berücksichtigung der pseudomorphen Verspannung auf Al-Anteile zwischen 7,8% für Probe FR8 und 25,9% für Probe FR3 folgern. Mit dieser Kenntnis lassen sich Polarisierung, effektive Massen und statische dielektrische Konstanten berechnen. Oberhalb der AlGaN-Bandlücke schließen sich in den Spektren Franz-Keldysh-Oszillationen an. Ihre Periode ist für die einzelnen Proben sehr unterschiedlich. Verdeutlicht wird dies in Abbildung 7.11 durch den Vergleich der Proben FR1 und FR6, welche auf der Energieachse um

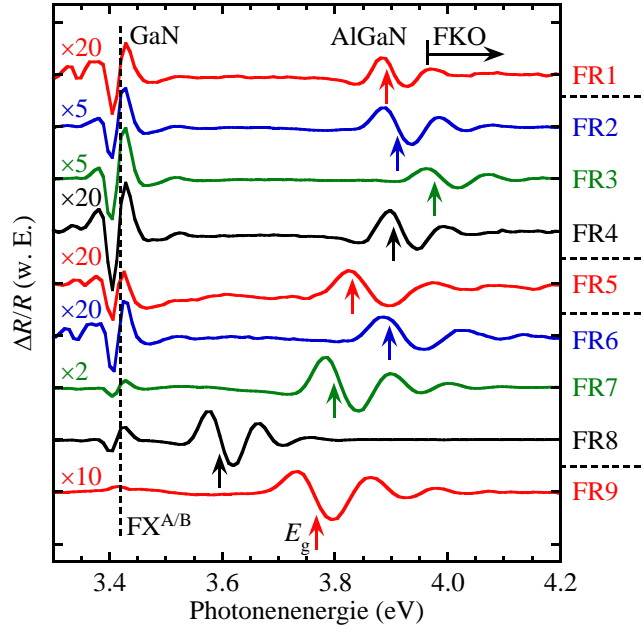


Abbildung 7.10: PR-Spektren der GaN/AlGaIn/GaN-Heterostrukturen mit dünner Deckschicht bei Raumtemperatur. FX^A von GaN und E_g von AlGaIn gekennzeichnet.

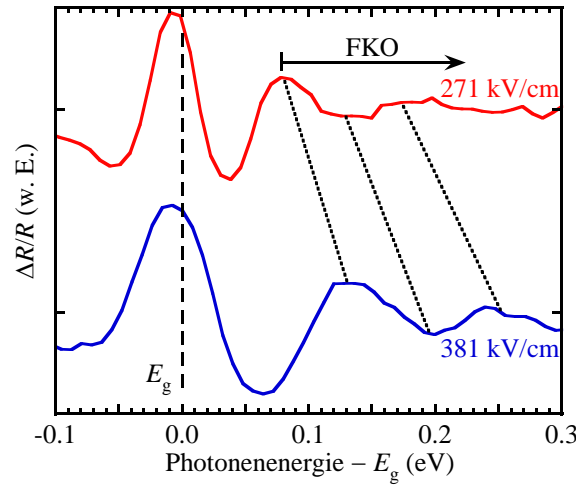


Abbildung 7.11: AlGaIn-Bereich der PR-Spektren der Proben FR1 (rot) und FR6 (blau) bei Raumtemperatur. Gestrichelte und gepunktete Linien bezeichnen Bandlücke und Extrema der FKO. F_b an den Spektren angegeben.

den Betrag ihrer Bandlücken verschoben wurden. Dank des fast gleichen Al-Anteils der beiden Proben, ist der Unterschied ihrer effektiven Interbandmassen vernachlässigbar und

7.2. GAN/ALGAN/GAN-HETEROSTRUKTUREN

der Abstand der FKO zur Bandlücke hängt ausschließlich von der elektrischen Feldstärke in den Barrieren ab. Die Energiepositionen der Extrema der FKO beider Proben weichen offenkundig stark voneinander ab. Die Linienformanalyse nach Gleichung (4.58) resultiert in einem um 110 kV/cm größeren F_b für Probe FR6. Die Ergebnisse aller Proben finden sich in Tabelle 7.1.

Durch die Kenntnis von F_b lassen sich die Elektronengasdichten der Proben berechnen. Dies geschieht analog zum vorhergehenden Kapitel unter Anwendung des Gaußschen Satzes auf das grün umrandete Gebiet in Abbildung 7.12. Gleichung (7.2) ist auch in diesem Fall gültig. Die Ergebnisse liegen zwischen 10^{12} und 10^{13} e/cm² und sind Tabelle 7.1 zu entnehmen. Zum Vergleich sind nochmals die Ergebnisse der Hallmessungen der Probenhersteller aufgeführt. Die Abweichungen liegen für die meisten Proben deutlich unter 10%, was der Genauigkeit bei der Bestimmung von F_b entspricht. Das zeigt die Eignung der PR, mittels zerstörungsfreier Messungen verlässliche Ergebnisse für die Flächenladungsträgerdichten von GaN/AlGaN/GaN-Heterostrukturen zu erzielen.

Aufgrund der geringen Dicken, lassen sich keine FKO der GaN-Deckschichten detektieren. F_c ist daher auf andere Art zu gewinnen. An der oberen GaN/AlGaN-GF (schwarzer Rahmen in Abbildung 7.12) befinden sich keine freien Ladungsträger, sondern nur die ortsfesten Polarisationsladungen. Somit gilt die Gleichung

$$\varepsilon_0 \varepsilon_{r,\text{GaN}} F_c = \varepsilon_0 \varepsilon_{r,\text{AlGaN}} F_b - \Delta P. \quad (7.5)$$

Die berechneten Feldstärken erreichen bis zu 1,7 MV/cm und sind in Tabelle 7.1 enthalten. Bei den kleinen Dickenverhältnissen d_c/d_b ist F_c deutlich größer als F_b . Mit den bekannten Werten von F_c kann man sich nun den Gegebenheiten an der Oberfläche zuwenden (roter Rahmen in Abbildung 7.12). Hier gruppieren sich die negativen Polarisationsladungen des GaN. Durch diese allein lassen sich die vorhandenen elektrischen Feldstärken nicht erklären. Vielmehr sind zusätzlich geladene OF-Zustände der Flächenladungsdichte σ_{ss} zu berücksichtigen, welche die Polarisationsladungen kompensieren. Ihr Ursprung kann z.B. in nicht abgesättigten Bindungen an der Oberfläche liegen. Wenn σ_{OF} die Nettoladung an der OF ist, kann man analog zu Gleichung (7.4) die Beziehung

$$\varepsilon_0 \varepsilon_r F_c = \sigma_{OF} = -\sigma_{P,\text{GaN}} + \sigma_{ss} \quad (7.6)$$

aufstellen, deren Ergebnisse in Tabelle 7.12 Eingang finden. Es ist festzustellen, daß sämtliche Proben-OFF leicht positiv geladen sind. Dies folgt aus dem positiven Vorzeichen der GaN-Feldstärke, welches bedeutet, daß die Bandkanten der Deckschichten zur Oberfläche hin abwärts geneigt sind. Offenbar werden die negativen Polarisationsladungen durch die

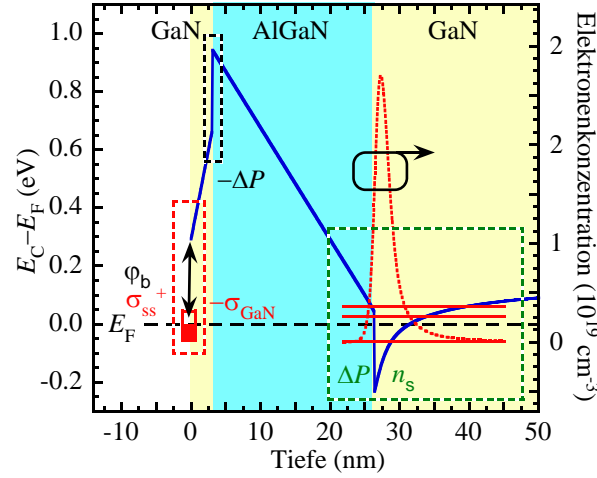


Abbildung 7.12: Leitungsbandkante von Probe FR6 (blau) bezogen auf die Fermienergie (schwarz) mit Energieeigenwerten und Konzentration des 2DEG (rot).

OF-Zustände nicht nur ausgeglichen, sondern sogar überkompensiert. Diese besitzen aufgrund ihres Vorzeichens einen donatorartigen Charakter, wie er bereits früher vermutet wurde [77].

Alle Größen, welche benötigt werden, um selbstkonsistente Berechnungen des Bandkantenverlaufes der GaN/AlGaN/GaN-Heterostrukturen anzustellen, sind jetzt bekannt. In der Rechnung wird das OF-Potential so lange variiert, bis das experimentell gefundene F_b von der Rechnung reproduziert wird. $N_{2\text{DEG}}$ und F_c stimmen zwangsläufig ebenfalls mit den vorhergehenden Betrachtungen überein. Abbildung 7.12 zeigt das Ergebnis am Beispiel von Probe FR6. Unterhalb der GaN-Deckschicht gleicht der Verlauf der Leitungsbandkante (blau) qualitativ dem einer einfachen AlGaN/GaN-Heterostruktur. An der Grenzfläche zwischen Barriere und Puffer bildet sich ein Potentialtopf aus, in dem sich ein 2DEG befindet. Von den quantisierten Zuständen ist nur der unterste besetzt. Die anderen befinden sich oberhalb der Fermienergie. Das Leitungsband der Deckschicht ist im Vergleich zum AlGaN entgegengesetzt verkippt. Das Valenzband schneidet an der GaN/AlGaN-GF noch nicht die Fermienergie, so daß die frühere Annahme, daß sich hier nur die Polarisationsladungen und keine freien Ladungsträger befinden, gerechtfertigt erscheint.

Den numerischen Rechnungen läßt sich für Probe FR6 ein OF-Potential von 0,259 eV entnehmen, welches deutlich unter dem der AlGaN/GaN-Probe MD5 liegt. Die Ergebnisse aller Proben sind in Tabelle 7.1 zusammengefaßt. Anhand der Übersicht läßt sich feststellen, daß das OF-Potential der Proben mit GaN-Deckschicht stets unterhalb von 0,45 eV

7.2. GAN/ALGAN/GAN-HETEROSTRUKTUREN

Tabelle 7.1: Elektrische Feldstärken und daraus berechnete Flächenladungsdichten und Oberflächenpotentiale der GaN/AlGaN/GaN-Heterostrukturen mit dünner Deckschicht.

Probe	d_c	F_b	$N_{2\text{DEG}}$ (10^{12} e/cm^2)		F_c	σ_{ss}	σ_{OF}	ϕ
	(nm)	(kV/cm)	PR	Hall	(kV/cm)	(10^{12} e/cm^2)	(10^{12} e/cm^2)	(eV)
FR1	-	-271	-7,75	-8,04	-	31,96	1,50	0,691
FR2	1	-267	-8,21	-8,13	1429	29,43	8,21	0,249
FR3	1	-256	-9,78	-9,28	1702	31,00	9,78	0,152
FR4	1	-242	-8,15	-8,47	1419	29,37	8,15	0,132
FR5	2,8	-378	-5,72		994	26,94	5,72	0,318
FR6	3	-381	-7,19	-7,93	1251	28,41	7,19	0,259
FR7	3	-362	-5,10	-5,58	888	26,32	5,10	0,339
FR8	3	-258	-1,48	-1,04	258	22,71	1,49	0,439
FR9	5,4	-367	-4,43		771	25,65	4,43	0,371

liegt. Offenbar wird die Fermienergie an der Oberfläche durch OF-Zustände festgehalten. Deren Flächendichte beträgt mindestens $\sim 3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, so daß bei den untersuchten Proben immer genügend Zustände umgeladen werden können, um das OF-Potential bei $0,3 \pm 0,2 \text{ eV}$ zu fixieren. Bei der Referenzprobe FR1 ($x = 0,22$) beträgt $\phi = 0,691 \text{ V}$. Ein ähnlicher Wert wurde schon für Probe MD5 mit $x = 0,19$ bestimmt. Verglichen mit den GaN-Oberflächen darf geschlußfolgert werden, daß ϕ mit steigendem Al-Gehalt an der Oberfläche kontinuierlich ansteigt. Die Unterschiede zwischen den einzelnen Proben mit Deckschicht können auf experimentelle Ungenauigkeiten zurückzuführen sein. Dies betrifft zum einen die Bestimmung von $E_{g,\text{AlGaN}}$ und F_b als auch Unsicherheiten bezüglich d_b und d_c . Speziell bei den hohen Feldstärken in den GaN-Deckschichten sorgen Abweichungen von 0,5 nm bereits für dramatische Änderungen in ϕ . Ein völlig anderer Grund ist womöglich im Wachstumsprozeß zu sehen. Das MOVPE-Wachstum findet bei Temperaturen von ca. 1100°C statt. Bei diesen Temperaturen kann ein Eindiffundieren von Al-Atomen in die Deckschicht nicht vollständig ausgeschlossen werden. Der Effekt sollte verstärkt bei höheren Al-Anteilen und geringen d_c zu beobachten sein. Um dies näher zu beleuchten, wurde in Abbildung 7.13 das OF-Potential über der Deckschichtdicke aufgetragen. Die Daten wurden mit entsprechenden Fehlerbalken versehen. Für Dicken von 2,8 bis 5,4 nm liegen die Ergebnisse für ϕ_b im Bereich zwischen 0,25 und 0,44 eV. Für die Proben mit $d_c = 1 \text{ nm}$, welche ebenfalls die höchsten Al-Anteile in der Barriere besitzen, wurden tiefere Werte ermittelt. Eine Interdiffusion zwischen Barriere und Deckschicht würde allerdings einen gegenteiligen Effekt bewirken, da für AlGaN höhere OF-Potentiale zu erwarten sind (siehe blaue Referenzpunkte in Abbildung 7.13). Es darf also prinzipiell von scharfen GaN/AlGaN-GF ausgegangen werden. Vielmehr stellt sich die Frage nach

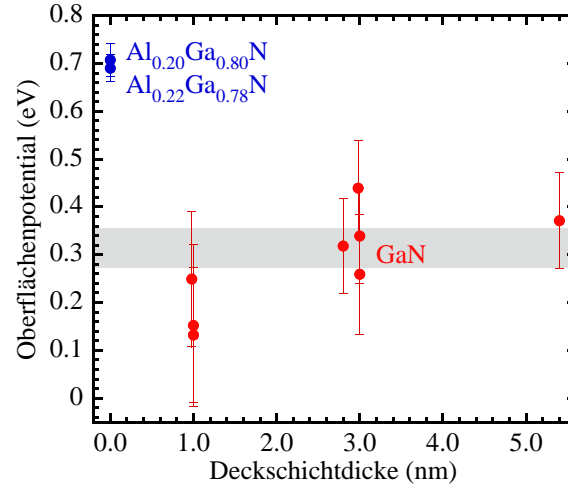


Abbildung 7.13: Oberflächenpotential der GaN/AlGaN/GaN-Heterostrukturen mit dünner Deckschicht. Proben MD5 und FR1 mit AlGaN-OF zum Vergleich. Fehlerbalken bezeichnen experimentelle Unsicherheit. Grauer Bereich markiert den Mittelwert mit Unsicherheit.

der Beschaffenheit der Deckschichten mit nur 1 nm Dicke. Wird das Material auf nur 4 Monolagen heruntergeätzt, so erstrecken sich Rauigkeiten, Oxidationseffekte der OF u.ä. schnell über die gesamte Schichtdicke, was präzise Aussagen über den Spannungszustand, die elektrische Feldstärke und das OF-Potential erschwert, wenn nicht unmöglich macht. Trotz der genannten Umstände muß betont werden, daß die Abweichungen zu den dickeren Schichten nur geringfügig sind und durchaus noch im Bereich der Meßtoleranzen liegen (siehe Fehlerbalken im Diagramm).

Mittelt man die Ergebnisse unter Berücksichtigung ihrer Unsicherheiten, so erhält man für die freie GaN-Oberfläche ein OF-Potential von $\phi_{b,\text{GaN}} = 0,315 \pm 0,041$ eV. Dieser Wert ist deutlich geringer als früher veröffentlichte Ergebnisse mit Werten von bis zu 1,4 eV [144–146], welche häufig als Eingangsparameter für die Berechnung von Bandkantenverläufen verwendet wurden [147–150]. Allerdings konnte schon 2002 gezeigt werden, daß das OF-Potential von GaN direkt nach dem Wachstum zwar sehr wohl von den Wachstumsbedingungen abhängen und 1,79 eV erreichen kann, es nach Lagerung an Luft aber in jedem Fall auf 0,3 eV absinkt [151]. Für technologische Anwendungen ist nur der letztgenannte Fall von Bedeutung. Neuere Arbeiten berichten ebenfalls niedrige Werte von ca. 0,5 eV [152, 153]. Auch Rechnungen mittels Dichtefunktionaltheorie in lokaler Dichteapproximation bzw. generalisierter Gradientenapproximation, führen bei moderaten Ga/N-Verhältnissen bei der Abscheidung zu dem Ergebnis, daß die Fermienergie an

7.2. GAN/ALGAN/GAN-HETEROSTRUKTUREN

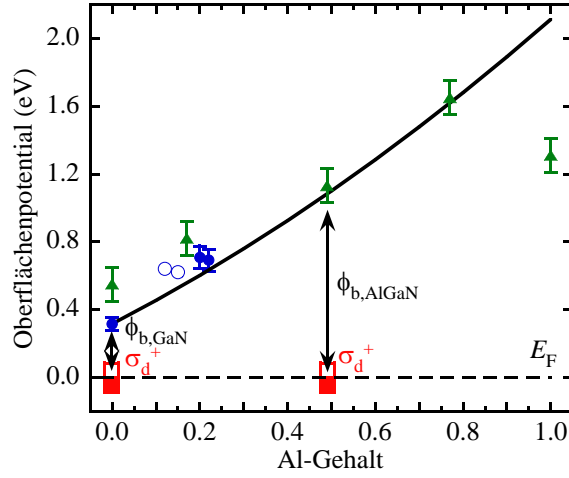


Abbildung 7.14: Experimentelle Daten für das OF-Potential von AlGaN (Symbole) und Abhängigkeit nach Gleichung (7.7) (schwarze Linie). Diese Arbeit – blaue Punkte, PR-Messungen von Winzer [76] – blaue Kreise, XPS-Messungen von Rizzi [152] – grüne Dreiecke. Teilweise positiv geladener OF-Zustand rot dargestellt.

der Oberfläche nur 0,5–0,7 eV unterhalb der Leitungsbandkante liegt [154]. Somit stehen die hier vorgestellten Ergebnisse im Einklang mit neuesten Werten aus der Literatur. Die Flächendichte der auftretenden Ladungsträgergase ist wesentlich für die Charakteristik von Bauelementen. Die Tatsache, daß sie empfindlich vom OF-Potential abhängt, verlangt nach einer unbedingten Berücksichtigung der gefundenen Erkenntnisse bei der Berechnung von Bandkantenverläufen.

Da das OF-Potential, wie man an den beiden Referenzpunkten in Abbildung 7.13 ablesen kann, vom Al-Gehalt an der Oberfläche beeinflusst wird, ist es wünschenswert, diese Abhängigkeit quantitativ zu erfassen. Den einfachsten Fall stellt die Approximation mit einer linearen Funktion dar. Es ist allerdings fraglich, ob dies im Einklang mit dem realen Verhalten ist. Unter der Annahme, daß die Energie der durch nicht abgesättigte Bindungen induzierten Oberflächenzustände kaum von der Art des jeweiligen Metallatoms, sondern hauptsächlich von den umgebenden N-Atomen bestimmt wird, sollte diese Energie näherungsweise konstant sein. Lediglich die Bandkanten verschieben sich mit steigendem Al-Gehalt relativ zur festen Energie des Oberflächenzustandes. Der Abstand zur Leitungsbandkante in Abhängigkeit von x ist in diesem Fall linear von der Leitungsbanddiskontinuität abhängig. Für ϕ_b muß demnach

$$\phi_b(x) = \phi_{b,\text{GaN}} + \Delta E_c(x) = \phi_{b,\text{GaN}} + 0,65(E_{g,\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} - E_{g,\text{GaN}}) \quad (7.7)$$

gelten. Die Funktion ist für den soeben ermittelten Wert von $\phi_{b,\text{GaN}} = 0,315$ in Abbil-

dung 7.14 dargestellt und mit den experimentellen Daten für die Proben MD5 und FR1 verglichen. Zusätzlich wurden auf ähnliche Art gewonnene Datenpunkte von Winzer [76] sowie Ergebnisse aus XPS-Messungen von Rizzi [152] eingezeichnet. Der donatorartige OF-Zustand, welcher teilweise geladen ist und die Fermienergie fixiert, wurde rot gekennzeichnet. Trotz teilweise signifikanter Abweichungen folgen die Datenpunkte über weite Bereiche dem Trend von Gleichung (7.7). Unterschiede lassen sich zum einen durch die experimentellen Unsicherheiten erklären, zum anderen durch die Tatsache, daß in der Gleichung davon ausgegangen wurde, daß die Art und Energie des OF-Zustandes vollständig unabhängig vom Al-Gehalt ist. Für genaue Aussagen wäre hier eine große Anzahl an Proben mit einem weitgefächerten Al-Anteil vonnöten. Die Herstellung von Proben hoher Qualität ist allerdings derzeit nicht für jedes beliebige x möglich. Desweiteren sind Untersuchungen mittels PR auf Material beschränkt, dessen Bandlücke unterhalb der Anregungsenergie des Lasers liegt. Trotz allem darf Gleichung (7.7) als wichtiges Werkzeug angesehen werden, um Eigenschaften von Bauelementen hinreichend genau vorhersagen zu können.

Ein wichtiges Ergebnis der Untersuchungen ist, daß eine GaN-Deckschicht nicht nur das OF-Potential verändert, sondern sie sich auch auf die Flächenladungsdichte des 2DEG auswirkt. Die auf das Fermi-niveau bezogene Leitungsbandkante ist an der AlGaIn/GaN-GF durch das 2DEG und an der Oberfläche durch OF-Zustände fixiert. Ebenso stehen F_b und F_c gemäß Gleichung (7.5) in fester Beziehung zueinander. Aus diesen Gegebenheiten folgt, daß die Leitungsbandkante des AlGaIn an der GaN/AlGaIn-GF im Vergleich zur freien AlGaIn-OF mit wachsendem d_c nach oben geschoben wird. Aus Abbildung 7.12 läßt sich beispielsweise ein Potential von 0,95 eV im Vergleich zu den 0,7 eV der Referenzprobe ablesen. Die Auswirkung ist völlig analog zum Anlegen einer Spannung von -0,25 V an eine AlGaIn/GaN-Heterostruktur gleichen Aufbaus und führt zu einem Anstieg des Betrages von F_b . Nach Gleichung (7.2) geht damit eine Verringerung der Flächenladungsdichte des 2DEG einher. Eine solche Verarmung durch das Aufbringen einer Deckschicht könnte bei geeigneter Probenstruktur Anwendungen für Transistoren ermöglichen, welche sich im spannungslosen Fall im Auszustand befinden sollen (*normally off*).

7.2.2 Heterostrukturen mit dicker GaN-Deckschicht

Nitridbasierte Heterostrukturen bieten sich aufgrund ihrer pyroelektrischen Eigenschaften für die Realisierung von mikro- und nanoelektromechanischen Systemen (MEMS bzw. NEMS) an. Die aktiven Schichten können dabei ausschließlich aus Nitridhalbleitern bestehen, was es ermöglicht, derartige Nanostrukturen mit der bestehenden Transistortech-

7.2. GAN/ALGAN/GAN-HETEROSTRUKTUREN

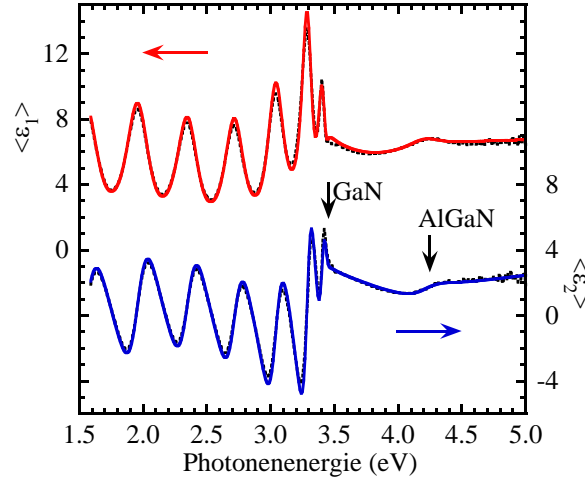


Abbildung 7.15: Experimentell bestimmte pseudodielektrische Funktion von Probe Z3 (schwarz) mit Modellanpassung (farbig) für $\theta_i = 72^\circ$. Bandlücken von GaN und AlGaIn mit Pfeilen gekennzeichnet.

nologie zu verkoppeln [7, 8]. Dies sowie die hohe Wachstumsqualität und Dotierbarkeit stellen erhebliche Vorteile gegenüber Keramiken dar. In AlGaIn/GaN-Heterostrukturen stellt das AlGaIn den piezoelektrisch aktiven Film dar, der durch Anlegen einer Spannung ausgelenkt und zum Schwingen gebracht werden kann. Der leitfähige Kanal des darunterliegenden 2DEG dient dabei als Rückkontakt. Die mechanischen Oszillationen können hinterher über Leitfähigkeitsmessungen des 2DEG ausgelesen werden. Das zu erzielende Resonanzverhalten solcher Strukturen diktiert dabei die Einhaltung gewisser Geometrien. Ein entscheidender Parameter ist dabei die Dicke eines solchen Systems. Aufgrund der großen Gitterfehlanpassung zwischen GaN und AlGaIn unterliegt das maximal erreichbare d_b allerdings starken Beschränkungen. Um jene zum umgehen, wird eine zusätzliche dicke GaN-Deckschicht aufgebracht. Auf diese Weise genügt man den Geometrieanforderungen, ohne ein verspannungsbedingtes Reißen des Materials befürchten zu müssen [7].

Als GaN/AlGaIn/GaN-Heterostrukturen der hier beschriebenen Art wurden die Proben Z1, Z2 und Z3 untersucht. Auch bei diesen Proben ist es für die Untersuchung ihrer Eigenschaften wichtig, die Schichtdicken genau zu kennen. Daher wird auf die bereits bewährte Methode der Spektralellipsometrie zurückgegriffen. Die Messungen fanden bei drei verschiedenen Einfallswinkeln statt. Abbildung 7.15 zeigt als Beispiel die Pseudo-DF von Probe Z3 bei $\theta_i = 72^\circ$. Es ergibt sich das typische Bild der Schichtdickeninterferenzen im niederenergetischen Bereich, welche bei der Absorptionskante des GaN aufhören. Im hochenergetischen Bereich ist trotz der hohen Absorption des dicken GaN-Filmes von

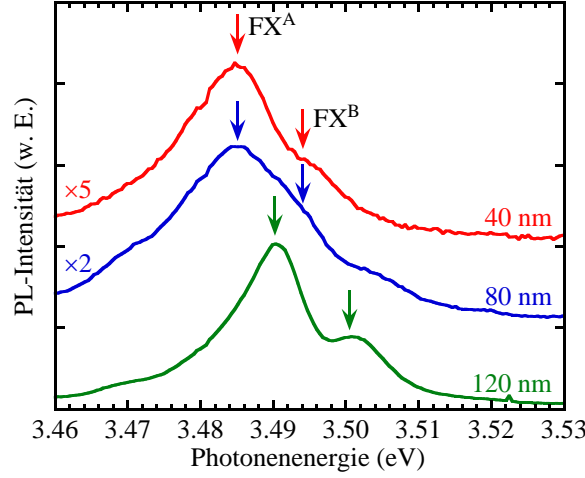


Abbildung 7.16: PL-Spektren der Proben Z1 (rot), Z2 (blau) und Z3 (grün). Normierungsfaktoren und d_c angegeben. Pfeile bezeichnen exzitronische Übergänge.

$\sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$ die Bandlücke des darunterliegenden AlGaInN erkennbar. Sie liegt bei 4,24 eV, was einem Al-Gehalt von 31% entspricht. Die gute Anpassung der Spektren mittels eines Vielschichtmodells gestattet die Bestimmung der Schichtdicken zu $d_b = 29 \text{ nm}$ und $d_c = 120 \text{ nm}$. Die ellipsometrisch bestimmten Daten aller Proben sind Tabelle 5.4 zu entnehmen.

Der Verspannungszustand der Proben ist zugänglich über die Photolumineszenz. Die entsprechenden Spektren, welche eine ähnliche Form für die drei Proben zeigen, werden in Abbildung 7.16 verglichen. Wesentliche Unterschiede treten bei der Intensität auf (Normierungsfaktoren beachten). Je dicker die Deckschicht ist (40, 80, 120 nm für Probe Z1, Z2, Z3), umso stärker kann das Laserlicht absorbiert werden, wodurch mehr Elektron-Loch-Paare generiert werden, die dann strahlend rekombinieren können. Bei allen drei Proben offenbaren sich das freie A- und B-Exziton. Bei den Proben Z1 und Z2 ist die Energieposition gleich, bei Probe Z3 ist sie um 5 meV verschoben. Der Vergleich mit unverspanntem Material zeigt, daß das GaN der Proben mit $\epsilon_{xx} = -0,0012$ (Z1, Z2) bzw. $\epsilon_{xx} = -0,0018$ (Z3) leicht kompressiv verspannt ist.

Für die Bestimmung der elektrischen Feldstärke in der AlGaInN-Barriere kommt nur die Elektreflexion in Frage, da die Al-Anteile zu hoch sind, um eine Modulation mit dem HeCd-Laser vorzunehmen. Die Abbildungen 7.17a) und 7.17c) zeigen die ER-Spektren des AlGaInN-Bereiches von Probe Z1 für $U_{dc} = +1 \text{ V}$ und $-6,5 \text{ V}$. Bei 4,30 eV befindet sich die Bandlücke des Materials, während im höherenergetischen Bereich FKO zu beobachten sind. Für die Bestimmung von E_g wurden die Spektren mit der Herangehensweise,

7.2. GAN/ALGAN/GAN-HETEROSTRUKTUREN

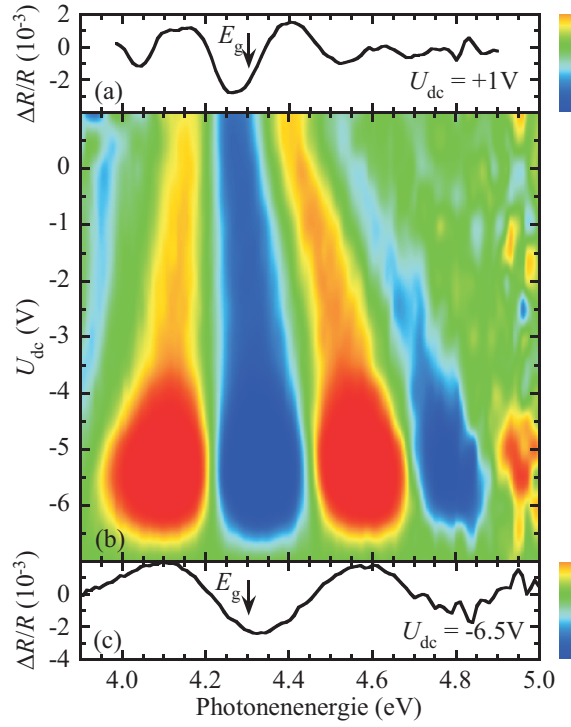


Abbildung 7.17: ER-Spektren des AlGaIn-Bereiches von Probe Z1. a) ER-Spektrum bei $U_{dc} = +1\text{ V}$, b) farbkodierte Spannungskarte der ER-Spektren und c) ER-Spektrum bei $U_{dc} = -6,5\text{ V}$. Bandlücke mit Pfeilen gekennzeichnet.

welche in den Referenzen [155] und [156] präsentiert wurde, analysiert. Die komplette Spektrenserie der Probe, die in Abbildung 7.17b) dargestellt ist, läßt ein kontinuierliches Anwachsen der Periode der FKO mit steigender Rückwärtsspannung erkennen. Demnach ist eine starke Zunahme von F_b zu verzeichnen. Unterhalb von $-6,5\text{ V}$ bricht die Signalamplitude zusammen. Wie in den vorhergehenden Abschnitten erläutert, bedeutet dies die vollständige Verarmung des 2DEG unterhalb der AlGaIn-Barriere bei negativeren Spannungen.

Die Proben Z2 und Z3 zeigen, wie man an den Beispielspektren in Abbildung 7.18 sieht, prinzipiell ein ähnliches Verhalten. Allerdings wird das AlGaIn-Signal mit steigendem d_c schwächer und verrauschter, da die Deckschicht das Meßlicht zu einem beträchtlichen Teil absorbiert und nur noch wenig bis zur AlGaIn-Barriere und wieder zurück an die Oberfläche vordringt. Für die beiden Proben findet man Bandlücken von 4,23 bzw. 4,24 eV. Auch hier steigt die Weite der Franz-Keldysh-Oszillationen mit der angelegten negativen Spannung. Ebenso tritt bei $-6,5\text{ V}$ die Verarmung des 2DEG ein.

Ein unabhängiger Nachweis der Verarmung kann durch Kapazitäts-Spannungsmes-

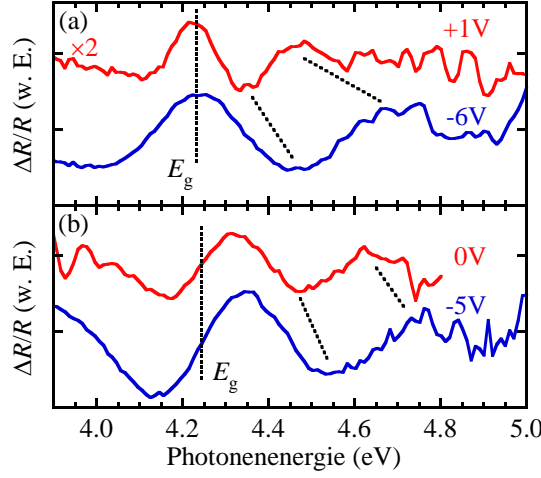


Abbildung 7.18: ER-Spektren des AlGaIn-Bereiches von a) Probe Z2 und b) Probe Z3 in Abhängigkeit von U_{dc} . Bandlücke und Extrema der FKO mit Linien gekennzeichnet.

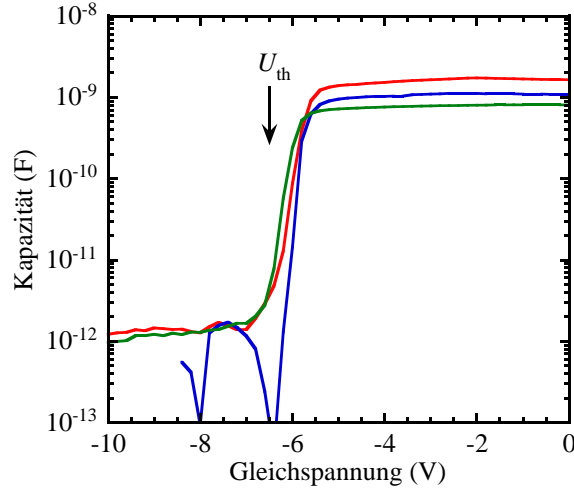


Abbildung 7.19: CV-Messungen der Proben Z1 (rot), Z2 (blau) und Z3 (grün). Schwellspannung des 2DEG mit Pfeil gekennzeichnet.

sungen erbracht werden. Die Spannung wurde zwischen eigens hierfür aufgebraachten Ni-Schottkykontakten und den ohmschen Kontakten angelegt. Die gefundenen Abhängigkeiten für die drei Proben sind in Abbildung 7.19 zusammengefaßt (Meßdaten von K. Tonisch). Bei geringen negativen Spannungen wirkt das Gebiet zwischen Schottkykontakt und 2DEG wie ein Plattenkondensator mit einer Kapazität von ~ 1 nF. Solange ein 2DEG existiert, wird die zweite Kondensatorplatte an der AlGaIn/GaN-GF festgehalten.

7.2. GAN/ALGAN/GAN-HETEROSTRUKTUREN

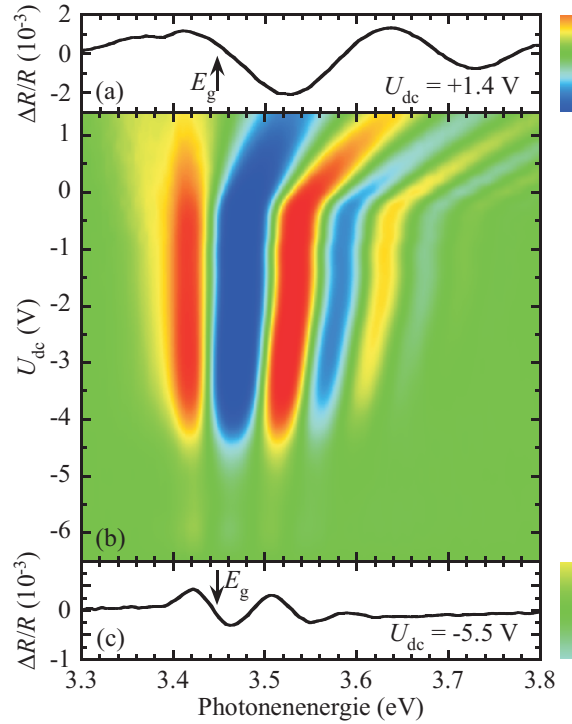


Abbildung 7.20: ER-Spektren des GaN-Bereiches von Probe Z1. a) ER-Spektrum bei $U_{dc} = +1,4 \text{ V}$, b) farbkodierte Spannungskarte der ER-Spektren und c) ER-Spektrum bei $U_{dc} = -5,5 \text{ V}$. Bandlücke mit Pfeilen gekennzeichnet.

Ist das 2DEG verarmt, wird sie mit dem Anwachsen der Raumladungszone gedanklich in die Tiefe der Probe weggedrängt. Durch den gestiegenen Abstand der Kondensatorplatten sinkt die Kapazität um mehrere Größenordnungen. Der Abfall der Kapazität geschieht bei allen drei Proben bei ca. $-6,5 \text{ V}$ und bestätigt die Aussagen der ER. Speziell bei Probe Z2 ist zu beachten, daß eine Kapazität von 10^{-12} F der Auflösungsgrenze des Meßgerätes entspricht.

Im Gegensatz zu den Proben mit dünner Deckschicht, ist es bei den hier vorgestellten möglich, vom oberen GaN-Film ein Elektroreflexionssignal zu erhalten, welches Aufschluß über dessen elektrische Feldstärke F_c gibt. Für Probe Z1 sind die Daten in Abbildung 7.20 zusammengefaßt. Die Bandlücke ist mit Pfeilen in den Einzelspektren gekennzeichnet. Energetisch oberhalb schließen sich die FKO an. Sie treten in großer Zahl auf und setzen sich dank ihrer geringen Dämpfung bis $4,2 \text{ eV}$ fort. Dies deutet auf große und vor allem sehr homogene elektrische Felder hin. Abbildung 7.20b) zeigt ein umgekehrtes Verhalten im Vergleich zur AlGaIn-Barriere. F_c wird offenbar für negative Spannungen kleiner, was an den deutlich enger werdenden FKO abzulesen ist. Daraus folgt zwangsläufig, daß

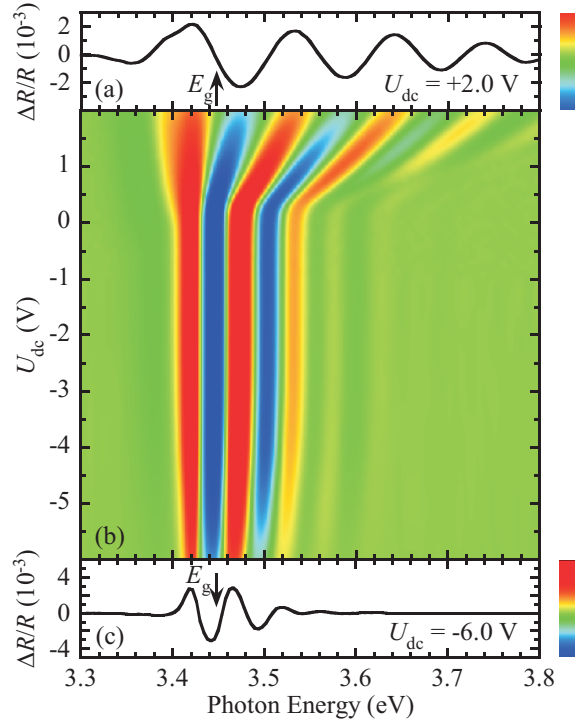


Abbildung 7.21: ER-Spektren des GaN-Bereiches von Probe Z2. a) ER-Spektrum bei $U_{dc} = +2$ V, b) farbkodierte Spannungskarte der ER-Spektren und c) ER-Spektrum bei $U_{dc} = -6$ V. Bandlücke mit Pfeilen gekennzeichnet.

Leitungs- und Valenzband in Richtung der Oberfläche abwärts geneigt sind. Die Bandverkipfung ist damit wie in den Rechnungen für kleine d_c gegensätzlich zur AlGaIn-Barriere. Ein genaueres Betrachten von Abbildung 7.20 enthüllt einen Knick in der Spannungsabhängigkeit der ER-Spektren bei $U_k = -0,2$ V. Bei höheren Spannungen ändert sich die Periode der FKO sehr stark, unterhalb jedoch kaum noch.

Die Spektren von Probe Z2 sind denen von Probe Z1 ähnlich (siehe Abbildung 7.21). Auch hier gibt es zahlreiche FKO, welche bis 4,2 eV zu verfolgen sind. Ein wesentlicher Unterschied zu Probe Z1 ist in der signifikant kürzeren Periode der FKO über den gesamten Spannungsbereich zu sehen. Unterhalb des Knicks, der hier bei $U_k = 0,3$ V liegt, scheint die elektrische Feldstärke bei dieser Probe nahezu konstant zu sein. Da die Spektren von Probe Z3 mit $U_k = 0,5$ V weitgehend identisch sind mit denen von Probe Z2, wird hier auf eine Darstellung verzichtet.

Die ER-Spektren aller drei Proben wurden im GaN- und AlGaIn-Bereich gemäß Gleichung (4.58) analysiert, um die spannungsabhängigen Werte für F_b und F_c zu ermitteln. Die Ergebnisse werden durch die Symbole in Abbildung 7.22 repräsentiert. Die sinken-

7.2. GAN/ALGAN/GAN-HETEROSTRUKTUREN

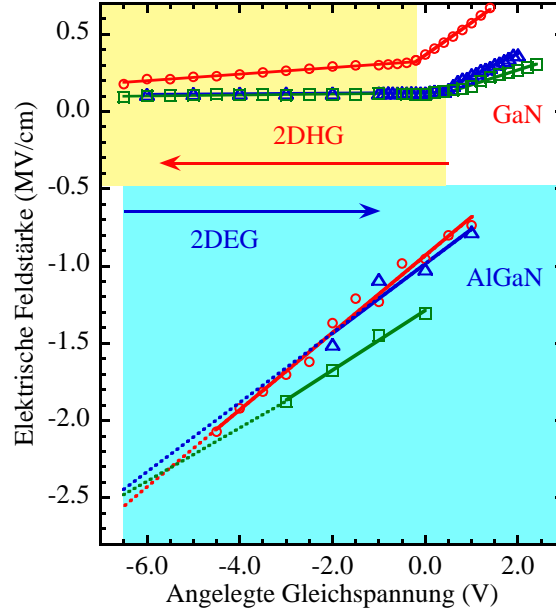


Abbildung 7.22: Elektrische Feldstärke der AlGaN-Barrieren und GaN-Deckschichten der Proben Z1 (rote Kreise), Z2 (blaue Dreiecke) und Z3 (grüne Vierecke) in Abhängigkeit von der angelegten Gleichspannung. Farbige Bereiche markieren das Vorhandensein eines 2DEG bzw. 2DHG.

de Intensität der AlGaN-Spektren erlaubt keine genaue Linienformanpassung unterhalb von $U_{dc} = -4,5\text{V}$. Daher wurden die Kurven bis zur Verarmungsspannung des 2DEG $U_{dc} = U_{th} = -6,5\text{V}$ extrapoliert, um die Verarmungsfeldstärken $F_b(U_{th})$ zu bestimmen. Sie belaufen sich auf $-2,55\text{ MV/cm}$ für Probe Z1 und $-2,45\text{ MV/cm}$ für die Proben Z2 und Z3 mit einer Unsicherheit von 5–10%. Der Unterschied ist dem geringeren Polarisationsgradienten an der Grenzfläche für Proben mit kleinerem Al-Anteil zuzuschreiben (vergleiche Kapitel 3.1 und 3.2). Nach Gleichung (7.1) ergibt sich beispielsweise aus der Feldstärke von Probe Z2 eine polarisationsinduzierte Flächenladung von $1,33 \times 10^{13} e/\text{cm}^2$ in Übereinstimmung mit der theoretischen Vorhersage für einen Al-Anteil von 31%. Damit wurde erneut die Zuverlässigkeit der Methode demonstriert.

Die elektrischen Feldstärken in den GaN-Deckschichten zeigen eine schwächere Abhängigkeit von U_{dc} im Vergleich zu den Barrieren. Im untersuchten Spannungsbereich variieren die Werte zwischen 100 und 700 kV/cm. Bei positiven Spannungen werden die Bänder an der Oberfläche nach unten verschoben. An der unteren Grenzfläche existiert ein 2DEG, welches das Ferminiveau fixiert. Der Potentialabfall teilt sich, wie aus Abbildung 7.22 hervorgeht, auf Deckschicht und Barriere auf, wodurch sowohl F_b als auch

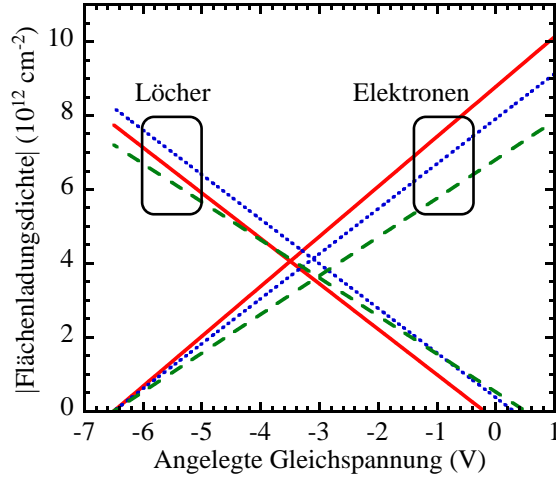


Abbildung 7.23: Spannungsabhängige Flächenladungsdichten des 2DEG und 2DHG von Probe Z1 (rot), Z2 (blau) und Z3 (grün).

F_c geändert werden. Der Anstieg von $F_c(U_{dc})$ ist dabei näherungsweise proportional zu $1/(d_b + d_c)$. Für ein kleiner werdendes U_{dc} weist die $F_c(U_{dc})$ -Charakteristik einen Knick auf. Wird U_{dc} weiter gesenkt, führt die Aufwärtsverschiebung der Bänder dazu, daß das Valenzband die Fermienergie schneidet. Als Folge davon formiert sich an der oberen GaN/AlGaN-GF ein 2DHG [148,149]. Wegen der großen Deckschichtdicken geschieht dies schon bei Spannungen nahe Null. Unterhalb der Knickspannung U_k bleibt die Feldstärke im GaN nahezu konstant und die angelegte Spannung fällt nur über der Barriere ab. Die lineare Abhängigkeit von F_c bezüglich der angelegten Gleichspannung in beiden Bereichen weist darauf hin, daß Raumladungseffekte vernachlässigbar sind.

Mit der Kenntnis der elektrischen Feldstärken ist es nun möglich, die Ladungsträgerdichten zu berechnen. Die nahezu konstante Feldstärke im GaN bei $U_{dc} < 0$ unter gleichzeitiger starker Änderung der Barrierenfeldstärke ist ein Hinweis auf drastische Umverteilungen der Ladungsträger in den Proben bei Anlegen einer Spannung. Die Elektronenkonzentration berechnet sich nach Gleichung (7.3). Bei dem Knick in $F_c(U_{dc})$ ist die Konzentration des Löchergases Null. Ausgehend von diesem Punkt erhält man die spannungsabhängige Flächendichte des 2DHG gemäß dem Gaußschen Satz aus der Änderung der Feldstärken von AlGaN und GaN:

$$N_{2DHG} = \varepsilon_0 \{ \varepsilon_{r,GaN} [F_c(U_{dc}) - F_c(U_k)] - \varepsilon_{r,AlGaN} [F_b(U_{dc}) - F_b(U_k)] \}. \quad (7.8)$$

Die Resultate der Gleichungen (7.3) und (7.8) für die drei Proben sind in Abbildung 7.23 zusammengefaßt. Ohne angelegte Spannung werden unter dem Gate der Proben Z1, Z2

7.2. GAN/ALGAN/GAN-HETEROSTRUKTUREN

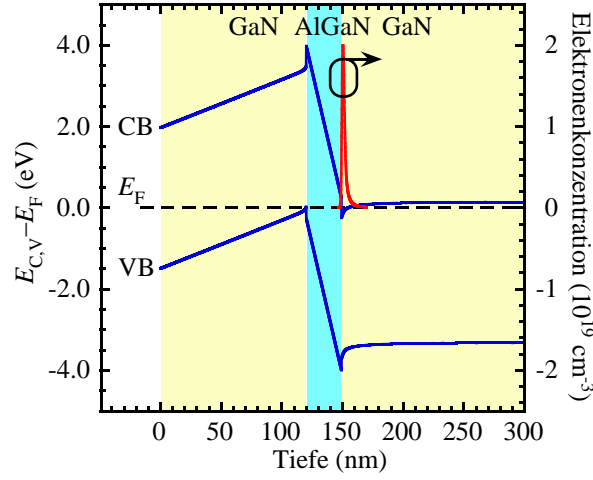


Abbildung 7.24: Leitungs- und Valenzbandkante von Probe Z3 in Bezug auf die Fermienergie für $U_{dc} = 0$ mit ortsabhängiger Ladungsträgerdichte.

und Z3 Elektronendichten von $-8,8$, $-7,9$ und $-6,8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ erreicht. Selbst für kleine negative Spannungen werden bei allen drei Proben 2DHG-Konzentrationen von einigen 10^{12} cm^{-2} erzielt. Standardmethoden, wie z.B. Hall-Messungen erlauben nur die Bestimmung der Elektronendichte des 2DEG, wegen der deutlich überragenden Beweglichkeit und Leitfähigkeit des 2DEG gegenüber dem 2DHG [145]. Die hier präsentierte optische Herangehensweise ermöglicht die Berechnung der Flächenladungsdichten von beidem, dem 2DEG und dem 2DHG.

Eine exakte Berechnung der Bandkantenverläufe der Proben ist mit dem vorhandenen Programm zur Lösung von Schrödinger- und Poissonsgleichung [76] nur eingeschränkt möglich, da die Schrödingergleichung nur für ein Band gelöst wird. Daher wird sich auf Probe Z3 beschränkt, bei der bei $U_{dc} = 0$ gerade noch kein Löchergas vorhanden ist. Das in Abbildung 7.24 dargestellte Ergebnis ähnelt unterhalb der Deckschicht den in den vorangegangenen Kapiteln untersuchten Proben. Der starke Polarisationsgradient führt aber einhergehend mit der vorgegebenen Schottkybarriere dazu, daß die Bänder an der oberen GaN/AlGaIn-GF durch die große Dicke der Abschlußschicht weit nach oben verschoben werden, was zu den sehr hohen Feldstärken im AlGaIn führt. Im gezeigten Beispiel schneidet das Valenzband beinahe die Fermienergie. Daher genügen, wie bereits in Abbildung 7.23 gezeigt, auch schon geringe negative Spannungen, um an dieser Grenzfläche ein 2DHG zu erzeugen. Für das dargestellte Beispiel folgt aus der Rechnung eine Au/GaN-Schottkybarriere von $1,97 \text{ V}$. Dabei ist allerdings die Schwierigkeit bei der Bestimmung von F_b aufgrund der stark absorbierenden Deckschicht zu beachten. Die Unsicherheit von

$\sim 10\%$ führt bereits zu einer Schwankung um $\pm 0,4$ V. Bei Probe Z1 existiert bereits ohne angelegte Spannung ein 2DHG. Aufgrund der hohen Löchermassen liegen die Subniveaus des 2DHG sehr nahe am Boden des Quantengrabens und somit wird das Valenzband des GaN an der GaN/AlGaIn-GF nicht wesentlich über der Fermienergie liegen. Geht man näherungsweise von einer bloßen Berührung des Fermi-niveaus aus, so läßt sich auch für diese Probe mit $F_c = 365$ kV/cm und $d_c = 40$ nm eine Schottkybarriere von 2,0 V abschätzen. Für eine genaue Analyse müßten die Lochzustände mittels der $(6 \times 6)\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode berechnet und in der Poisson-Gleichung berücksichtigt werden [147, 148].

7.3 AlN/GaN-Supergitter

Eine besondere Form von Heterostrukturen sind Supergitter. Bei ihnen wird eine bestimmte Schichtabfolge mit wechselnder Bandlücke häufig periodisch wiederholt. Sind die Filme mit der kleineren Bandlücke sehr dünn, treten Quanteneffekte auf. Man spricht dann von einem Multiquantengraben. Ein Spezialfall hiervon ist das Supergitter, bei dem auch die Barrierendicken, die die Gräben separieren, sehr dünn sind. Bei geeigneten Abmessungen und entsprechender Materialauswahl erstrecken sich die Wellenfunktionen der Elektronen und Löcher nicht mehr nur auf einen einzelnen Quantengraben, sondern sind über mehrere bzw. alle Gräben ausgedehnt. Die einzelnen Gräben können dann nicht mehr getrennt betrachtet werden, sondern stellen ein gekoppeltes System dar.

Aus Nitridhalbleitern bestehende Supergitter haben den Vorteil großer Banddiskontinuitäten. So sind auch bei geringen Abmessungen mehrere gebundene Zustände für Elektronen und Löcher möglich. Daraus resultierende Bauelemente sind Infrarotemitter bzw. -detektoren für die Telekommunikation [25]. Sie basieren auf Intersubbandübergängen. Ebenso wurden bereits Quantenkaskadenlaser vorgestellt [26]. Mit der richtigen Dimensionierung solcher Strukturen für gezielte Anwendungen sind bei Nitridhalbleitern einige Schwierigkeiten verknüpft. Im AlGaIn/GaN-System ist kein gitterangepaßtes Wachstum möglich. Vielmehr kommt es je nach Al-Gehalt zu großen Verspannungen in der Wachstumsebene, wodurch die Bandlücken und damit auch die quantisierten Übergangsenergien dramatisch verschoben werden. Bei c -achsenorientierten Proben treten durch die spontane Polarisierung und die hinzuzuaddierende piezoelektrische Polarisierung extreme elektrische Felder in der Quantisierungsrichtung auf. Dies führt ebenfalls zu bedeutenden Energieverschiebungen. Das Vorhandensein derartig signifikanter Verspannungen und elektrischer Felder, die ihrerseits wieder von der Verspannung abhängen, macht eine umfangreiche Charakterisierung derartiger Strukturen unerlässlich. Gleichzeitig ist es von Interesse, die Eigenschaften solcher Supergitter mit numerischen Rechnungen zu vergleichen, um eine

7.3. ALN/GAN-SUPERGITTER

gezielte Dimensionierung für spezifische Anwendungen zu ermöglichen.

In diesem Kapitel sollen drei Supergitter mit variierender Graben- bzw. Barrierendicke zunächst mittels Spektralellipsometrie vorcharakterisiert werden, um anschließend die quantisierten Zustände mit Photolumineszenzmessungen und Modulationsspektroskopie zu untersuchen.

7.3.1 Spektralellipsometrie

Die Ellipsometriemessungen an den Proben wurden sowohl im Labor als auch am BESSY durchgeführt. Abbildung 7.25 zeigt die experimentellen Daten für die ellipsometrischen Parameter aller drei Proben bei einem Einfallswinkel nahe 68° (gepunktet). Die Labormessungen wurden zusätzlich bei 62° und 74° durchgeführt (nicht dargestellt). Alle Spektren zeigen unterhalb von 3,42 eV dicht beieinander liegende Oszillationen, bedingt durch Vielfachreflexionen in der dicken GaN-Schicht. Wenn die Absorption des GaN-Materials einsetzt, ändert sich die Periode der Oszillationen, da diese nun nur noch durch die Interferenzen in den eigentlichen Supergitterstrukturen bestimmt ist. Energetisch oberhalb liegt die Absorptionskante der Supergitter, welche sich insbesondere in Δ offenbart. Sie kann dem Grundzustandsübergang vom ersten Subband der schweren Löcher zum ersten Subband der Elektronen (e1h1) zugeordnet werden. Die Energieposition verschiebt sich

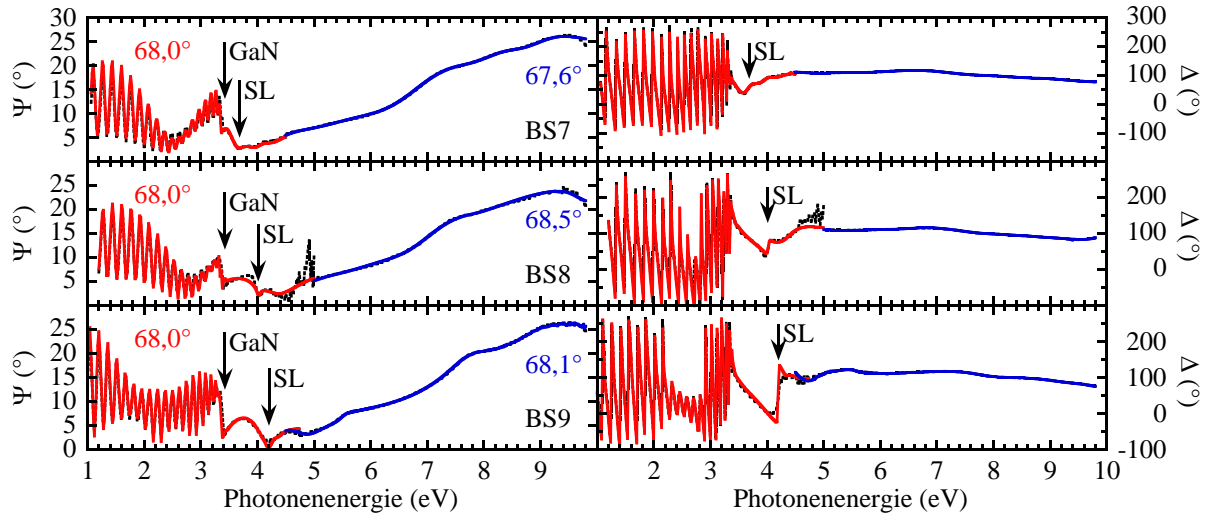


Abbildung 7.25: Ellipsometrische Parameter Ψ und Δ der Supergitterproben. Jeweilige Einfallswinkel an den Spektren angegeben. Pfeile bezeichnen Absorptionskante von GaN und Supergittern.

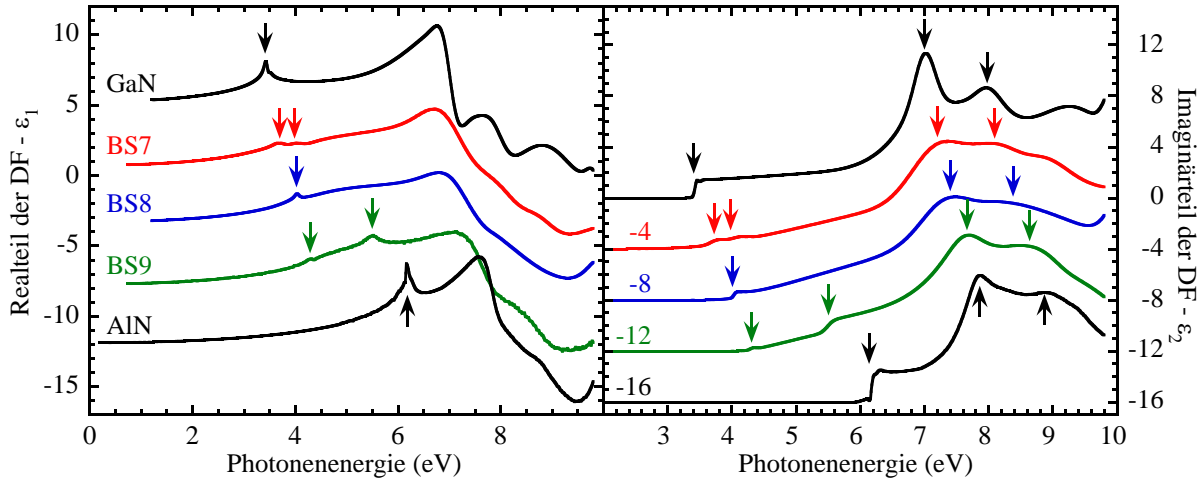


Abbildung 7.26: Real- und Imaginärteil der DF der Supergitter. Spektren wurden entsprechend der angegebenen Zahlen vertikal verschoben. Optische Übergänge mit Pfeilen gekennzeichnet. GaN und AlN zum Vergleich.

mit der Schichtdicke der Barrieren und Quantengraben und liegt für die Proben BS7, BS8 und BS9 bei 3,7, 4,0 bzw. 4,3 eV. Daraus läßt sich schlußfolgern, daß sich die Übergangsenergie des Grundzustandes mit sinkender Graben- und steigender Barrierendicke erhöht.

Für die Analyse der Daten wurde ein Schichtmodell entwickelt, welches aus dem Substrat, dem AlN-Puffer, einer dicken GaN-Schicht und dem Supergitter selbst besteht. Zusätzlich sind Grenzflächen- und Oberflächenrauhigkeiten berücksichtigt. Aufgrund der quantenmechanischen Charakteristik können die Einzelschichten der Supergitter nicht als separate Filme mit Volumeneigenschaften behandelt werden. Vielmehr werden die 20fach-Stapel im Modell als effektives Medium aufgefaßt. Die Anpassung der Schichtdicken im Modell sowie der DF der Supergitter resultiert in den durchgezogenen Linien in Abbildung 7.25. Trotz der Komplexität der Schichtsysteme werden die experimentellen Daten gut wiedergegeben. Dies erlaubt es, die dielektrische Funktion der Supergitter darzustellen. Abbildung 7.26 zeigt die jeweiligen Real- und Imaginärteile. Für alle drei Proben ist in ε_2 eine schwache Absorptionskante erkennbar. Ihre Energieposition stimmt mit der aus Abbildung 7.25 abgelesenen überein und wird e1h1 zugeschrieben. Für die Proben BS7 und BS9 ist eine zweite Absorptionskante sichtbar. Diese liegt bei 4,0 eV (BS7) bzw. 5,5 eV (BS9). Es handelt sich dabei um Übergänge mit Beteiligung höherer Subbänder. Ihre Identifikation wird erst durch die später gezeigten Rechnungen ermöglicht. Für Probe

7.3. ALN/GAN-SUPERGITTER

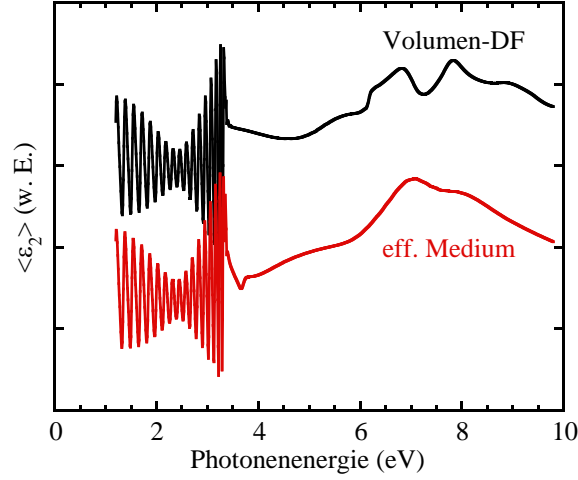


Abbildung 7.27: Imaginärteil der experimentell bestimmten Pseudo-DF von Probe BS7 (rote Kurve) im Vergleich mit dem simulierten $\langle \varepsilon_2 \rangle$ unter der Annahme von Volumeneigenschaften für sämtliche Schichten der Probenstruktur. Kurven vertikal verschoben.

BS8 kann dieses Phänomen nicht beobachtet werden. Jener Übergang hätte vermutlich eine Energieposition zwischen 4,5 und 5,0 eV und liegt somit im Grenzbereich der beiden Ellipsometer. Speziell bei dieser Probe ist das Signal-Rausch-Verhältnis im betreffenden Teil des Spektrum sehr schlecht wie aus Abbildung 7.25 zu ersehen ist.

Betrachtet man den hochenergetischen Bereich, so ist festzustellen, daß sich die höheren CPBS ebenfalls mit sinkender Graben- und steigender Barrierendicke zu höheren Energien verschieben, wenngleich diese Verschiebung im Vergleich zum bandkantennahen Bereich geringer ausfällt. Somit spielen Quanteneffekte nicht nur am Γ -Punkt der Brillouinzone eine Rolle, sondern sie wirken sich auf die gesamte Bandstruktur aus. Verdeutlichen läßt sich dies anhand der gemessenen Pseudo-DF von Probe BS7 (rote Kurve in Abbildung 7.27). Verwendet man das Modell und ersetzt das effektive Medium, welches das Supergitter beschreibt durch einen 20fach-AlN/GaN-Stapel, dessen Einzelschichten Volumeneigenschaften aufweisen, so erhält man die schwarze Kurve in Abbildung 7.27. Die Absorptionskante wird nicht reproduziert. Auch die Linienform im hochenergetischen Bereich weicht deutlich vom Experiment ab. Es ist zu schlußfolgern, daß die Einzelfilme der Supergitter nicht voneinander losgelöst betrachtet werden können, sondern eine quantenmechanische Kopplung aufweisen, welche sich über den gesamten Spektralbereich erstreckt. Die Kopplung rechtfertigt auch die Beschreibung der optischen Eigenschaften der Multilagen in ihrer Gesamtheit im Rahmen eines effektiven Mediums.

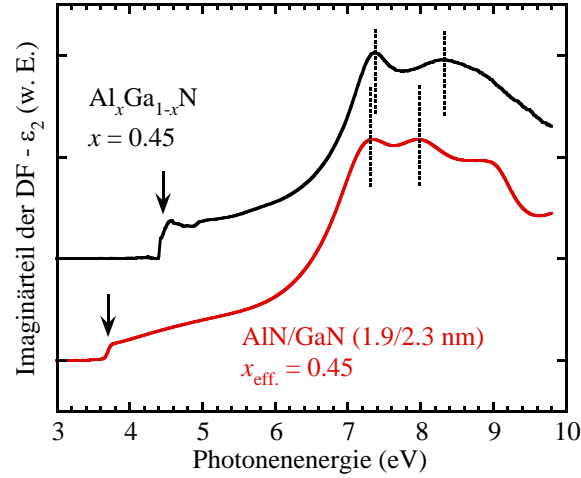


Abbildung 7.28: Imaginärteil der DF von AlGaIn der Probe BS5 und des Supergitters von Probe BS7. Jeweilige CPBS durch Pfeile und gestrichelte Linien markiert. Kurven sind vertikal verschoben.

Interessanterweise gibt es eine große Ähnlichkeit der Linienform der DF der Supergitter zu AlGaIn. Augenfällig wird dies durch den Vergleich mit der DF von GaN und AlN, welche Abbildung 7.26 hinzugefügt wurden. Es mag der Verdacht aufkommen, es handele sich bei den Proben nicht um ein Vielschichtsystem, bestehend aus AlN und GaN, sondern um AlGaIn-Mischkristalle. Derartige Befürchtungen sollen am Beispiel von Probe BS7 zerstreut werden. Das Schichtdickenverhältnis von AlN zu GaN beträgt 1,9 nm zu 2,3 nm. Dies ergibt einen mittleren Al-Gehalt von 45%. In Abbildung 7.28 wird daher die DF des Supergitters mit der von Probe BS5 verglichen, welche ebenfalls einen Al-Anteil von $x = 0,45$ besitzt. Bei der Gegenüberstellung findet sich keinerlei Übereinstimmung der Energiepositionen markanter Punkte in den Spektren. Das Vorliegen eines Mischkristalles anstelle eines Supergitters ist daher auszuschließen.

7.3.2 Photolumineszenz und Modulationsspektroskopie

Aus den Ellipsometriedaten lassen sich bereits erste Erkenntnisse über optische Übergänge zwischen quantisierten Zuständen am Γ -Punkt der Brillouinzone gewinnen. Für eine detailliertere Untersuchung mit höherer spektraler Auflösung sind die kontaktlosen Methoden der Photolumineszenz und der Photoreflexion geeignet.

Der vorhandene HeCd-Laser hat eine Energie von 3,815 eV. Diese ist zu niedrig, um in allen drei Supergittern Elektron-Loch-Paare zu erzeugen, welche anschließend strah-

7.3. ALN/GAN-SUPERGITTER

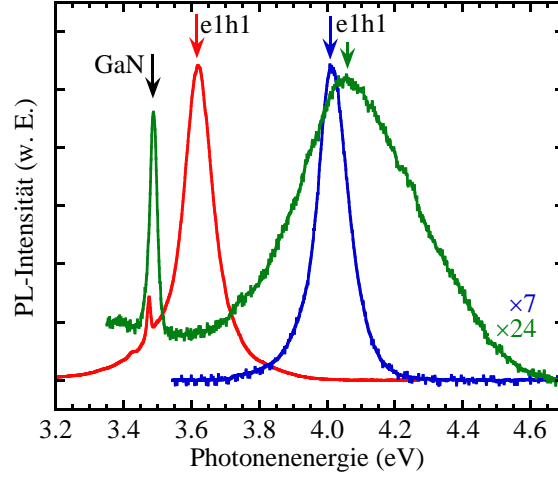


Abbildung 7.29: PL-Messungen an den Supergitter-Proben BS7 (rot), BS8 (blau) und BS9 (grün) bei $T = 5$ K. Spektren entsprechend der angegebenen Faktoren normiert. Pfeile bezeichnen optische Übergänge.

lend rekombinieren sollen. Aus diesem Grund wurden die PL-Messungen an der TU Braunschweig durchgeführt, wo ein frequenzvervierfacher Nd:YAG-Laser mit einer Anregungsenergie von 4,661 eV zur Verfügung steht. Die PL-Intensität sinkt mit steigender Temperatur rasch um mehrere Größenordnungen. Zudem nimmt die Linienbreite oft sehr stark zu, was eine genaue Bestimmung der Übergangsenergien erschwert. Daher sind die hier gezeigten Messungen auf $T = 5$ K beschränkt. Abbildung 7.29 zeigt die gewonnenen Spektren. Knapp unterhalb von 3,45 eV befindet sich jeweils eine Spitze im Spektrum, welche von den unter den Supergittern befindlichen GaN-Puffern stammt. Das Hauptmaximum der Kurven bezeichnet die Lumineszenz der Supergitter. Wie es sich schon bei den Ellipsometriemessungen andeutete, gibt es eine deutliche Abhängigkeit der Übergangsenergie des Grundzustandes von den Graben- und Barrierendicken. Wird d_w von 2,3 auf 1,4 nm verringert, verschiebt sich das PL-Signal von 3,620 zu 4,012 eV. Wird nun zusätzlich d_b von 1,9 auf 5,7 nm erhöht, kommt es zu einer erneuten Blauverschiebung zu 4,057 eV. Zu beachten ist, daß bei Probe BS9 die Linienbreite viermal so groß ist wie bei den anderen Proben. Auch ist die Intensität des Signals sehr gering, wie an den Normierungsfaktoren im Diagramm zu erkennen ist. Für dieses Verhalten sind mehrere Gründe in Betracht zu ziehen. Bei den geringen Grabendicken sind Inhomogenitäten der Schichtdicken von Graben zu Graben denkbar. Unterschiede von einer einzelnen Monolage haben bereits großen Einfluß auf die Übergangsenergie. Inhomogenitäten innerhalb der einzelnen Gräben sind ebenfalls möglich durch den Beginn des Wachstums einer neu-

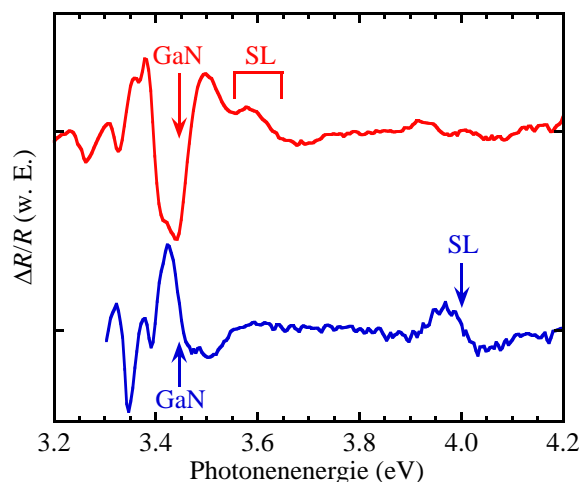


Abbildung 7.30: PR-Spektren der Supergitter BS7 (rot) und BS8 (blau) bei Raumtemperatur. Optische Übergänge gekennzeichnet. Spektren vertikal verschoben.

en Monolage, bevor die darunterliegende vollständig geschlossen ist. Die Verspannung der einzelnen SL-Schichten hängt, wie später noch gezeigt wird, vom Verhältnis ihrer Dicken zueinander ab (siehe Kapitel 7.3.3). So wird für die Quantengraben in Probe BS9 die größte Verspannung erwartet, was hier zu einer verstärkten Reißbildung in der Probe führen könnte. Auch steigt die elektrische Feldstärke im Quantengraben mit sinkender Graben- und steigender Barrierendicke. Die auftretenden Felder von einigen MV/cm bewirken eine Verringerung des Überlapps der Wellenfunktionen von Elektron und Loch, was eine geringe Rekombinationswahrscheinlichkeit zur Folge hat. Die genannten Effekte tragen gemeinsam zu einer geringen PL-Intensität und hohen Linienbreite bei. Dies kann die Ursache für das vergleichsweise schlechte Signal von Probe BS9 sein. Bei den anderen beiden Proben bestätigen die in den PL-Spektren gefundenen Übergangsenergien die Aussagen aus der Ellipsometrie.

Ergänzend zur emissionsbasierten Photolumineszenz, wurden auch absorptionsbasierte PR-Untersuchungen durchgeführt. Da sich die Lumineszenz hier als störender Untergrund auswirkt, fanden die Messungen bei Raumtemperatur statt. Für Probe BS7 wurde die Anregung mit einem HeCd-Laser vorgenommen. Für die anderen Proben wurde eine Deuteriumlampe als Anregungsquelle verwendet. Die aufgenommenen Spektren finden sich in Abbildung 7.30. Bei ca. 3.45 eV befindet sich das Signal des GaN-Puffers mit vorgelagerten Oszillationen, welche durch den linearen elektrooptischen Effekt bedingt sind. Oberhalb der GaN-Bandlücke offenbart sich das Signal der Supergitter. Für Probe BS8 ist es bei 4,004 eV zu finden. Bei Probe BS7 liegt der Grundzustandsübergang bei $3,615 \pm 0,01$ eV.

7.3. ALN/GAN-SUPERGITTER

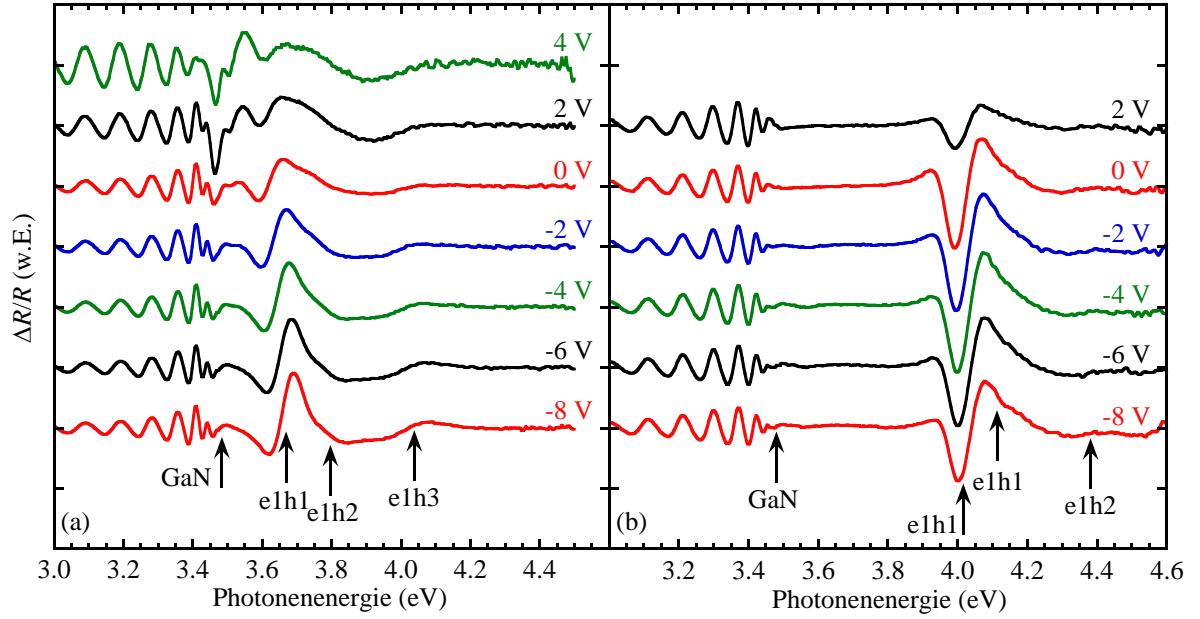


Abbildung 7.31: ER-Spektren der Supergitter a) BS7 und b) BS8 bei $T = 80$ K in Abhängigkeit der angelegten Gleichspannung. Optische Übergänge gekennzeichnet. Spektren vertikal verschoben.

Eine genauere Bestimmung wird hier durch den teilweisen Überlapp mit dem Signal des GaN verhindert. Bei Probe BS9 ist das Signal des Supergitters nicht detektierbar, weshalb auf eine Darstellung des Spektrums verzichtet wird. Die Übergangsenergien der Grundzustände beider Proben koinzidieren mit jenen, die in der Ellipsometrie gefunden wurden. Leider konnte in der PR der große Vorteil der Modulationsspektroskopie, auch angeregte Zustände zu detektieren, nicht ausgespielt werden. Dies liegt an der geringen Laserenergie und der kleinen Intensität der Deuteriumlampe.

Um dieses Manko zu umgehen, bietet es sich an, die Proben zu kontaktieren, um Elektroreflexionsmessungen vornehmen zu können. Aus diesem Grund wurden die Proben mit ohmschen Ti/Al-Kontakten sowie 10 nm dicken, semitransparenten Pt-Schottkykontakten versehen. Zwischen diesen Kontakten wurden Wechselspannungen von $U_{ac} = 2$ V angelegt, welchen jeweils eine Gleichspannung U_{dc} überlagert wurde. So ist es möglich, die elektrischen Felder zu modulieren und gleichzeitig über einen weiten Bereich durchzustimmen. Da bei der ER in der Regel keine Lumineszenz auftritt, wurden die Messungen hier für eine bessere Auflösung bei $T = 80$ K durchgeführt. Auch in den ER-Spektren ließ sich kein Signal des SL von Probe BS9 beobachten. Die U_{dc} -abhängigen Spektrenserien der Proben

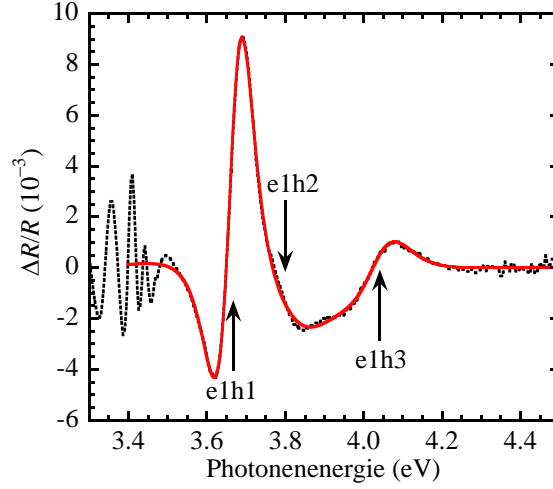


Abbildung 7.32: ER-Spektrum von Probe BS7 bei $U_{dc} = -8$ V (schwarz gepunktet) und Anpassung (rot durchgezogen). Optische Übergänge gekennzeichnet.

BS7 und BS8 sind in Abbildung 7.31 zusammengefaßt. Erneut sind niederenergetische Schichtdickeninterferenzen erkennbar, welche an der GaN-Bandlücke aufhören. Vom GaN selbst ist nichts zu sehen, da die angelegte Spannung fast ausschließlich über dem Supergitter abfällt. Der GaN-Puffer wird daher nicht moduliert. Klar treten hingegen mehrere SL-Übergänge in Erscheinung. Die exakte Energieposition erhält man aus einer Linienformanalyse nach Gleichung (4.44). Dies ist am Beispiel von Probe BS7 bei $U_{dc} = -8$ V in Abbildung 7.32 illustriert. Die Anpassung der Parameter in Gleichung (4.44) offenbart drei Übergänge und ist in der Lage, den relevanten Teil des aufgenommenen Spektrums wiederzugeben. Die genauesten Resultate lassen sich für negative Spannungen erzielen, da hier die Signale ausgeprägter sind und eine höhere Amplitude aufweisen. Das größte Signal stammt vom Übergang des Grundzustandes (e1h1) bei 3,667 eV. Hinter dem asymmetrischen Ausläufer auf der hochenergetischen Seite verbirgt sich ein zweiter Übergang bei 3,799 eV. Der Dritte bei 4,037 eV ist getrennt auflösbar und koinzidiert mit der zweiten Absorptionskante in der DF (vergleiche Abbildung 7.26). Die genannten Übergänge verschieben sich mit steigender Gleichspannung zu niedrigeren Energien. Der Unterschied zwischen $U_{dc} = -8$ V und 0 beträgt für den Grundzustand 68 meV und unterstreicht den entscheidenden Einfluß elektrischer Felder auf die optischen Eigenschaften der Supergitter. Die Spektren von Probe BS8 haben eine ähnliche Linienform. Auch hier sind drei Übergänge erkennbar, welche allerdings (wie später gezeigt wird) anders zugeordnet werden. Die gefundene Übergangsenergie des e1h1-Übergangs liegt bei $U_{dc} = -8$ V bei 4,016 eV. Bei dieser Probe beträgt die Rotverschiebung bei $U_{dc} = 0$ nur 20 meV.

7.3. ALN/GAN-SUPERGITTER

Dies läßt sich leicht mit der geringeren Grabendicke erklären, wenn man die Tatsache berücksichtigt, daß der Quanten-Starkeffekt proportional zu d_w^4 ist.

7.3.3 Quantenmechanische Berechnungen

Eine Identifikation der höherenergetischen Signale in den ER-Spektren ist nicht ohne begleitende Rechnungen möglich. Hierzu sind die Bandkantenverläufe für das Leitungs- und das Valenzband unter der Berücksichtigung der Polarisationsladungen zu berechnen. Daraus ergeben sich sodann die Energieeigenwerte und Wellenfunktionen für die einzelnen Subbänder. Eine entscheidende Eingangsgröße ist der Verspannungszustand der Einzelschichten, da dieser über die Deformationspotentiale die Bandlücke der Materialien beeinflußt und außerdem die Höhe der piezoelektrischen Polarisation bestimmt. Die Berechnung erfolgt über die Herangehensweise von Ridley [157]. Die Verspannung in dem c -achsenorientierten Material ist biaxial isotrop ($\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon$). Da das Material in z -Richtung relaxieren kann, gilt außerdem $\sigma_{zz} = 0$. Setzt man diese Nebenbedingungen in Gleichung (2.21) ein, dann erhält man

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \left(C_{11} + C_{12} - \frac{2C_{13}^2}{C_{33}} \right) \epsilon = C\epsilon \quad (7.9)$$

mit C als sogenannter uniaxialer elastischer Konstante. Wenn sich das System im Gleichgewicht befindet, dann muß die mechanische Gesamtspannung in der Ebene verschwinden. Sie ergibt sich aus der Summation über σ aller Einzelschichten, gewichtet nach der jeweiligen Anzahl an Elementarzellen:

$$\sum_k \sigma_k \frac{d_k}{a_k} = 0. \quad (7.10)$$

Hierbei bezeichnet d_k die Dicke der k -ten Schicht sowie a_k ihre Gitterkonstante. Wenn man davon ausgeht, daß sich eine Gleichgewichtsgitterkonstante a^* einstellt, so ist die Verspannung zweier Schichten k und j durch

$$\epsilon_k = \frac{a^* - a_k}{a_k} \quad (7.11)$$

und

$$\epsilon_j = \frac{a^* - a_j}{a_j} \quad (7.12)$$

gegeben. Stellt man Gleichung (7.11) nach a^* um und setzt den Ausdruck in Gleichung (7.12) ein, dann erhält man

$$\epsilon_j = \frac{\epsilon_k a_k + a_k - a_j}{a_j}. \quad (7.13)$$

Damit ergibt sich

$$\sum_j \sigma_j \frac{d_j}{a_j} = \sum_j C_j \epsilon_j \frac{d_j}{a_j} = \frac{C_k d_k}{a_k} \epsilon_k + \sum_{j \neq k} \frac{C_j d_j}{a_j} \frac{\epsilon_k a_k + a_k - a_j}{a_j} = 0. \quad (7.14)$$

Durch Umformen des letzten Teils der Gleichung gelangt man zu

$$\frac{C_k d_k}{a_k} \epsilon_k + \sum_{j \neq k} \frac{C_j d_j}{a_j^2} \epsilon_k a_k = \sum_{j \neq k} \frac{C_j d_j}{a_j^2} (a_j - a_k), \quad (7.15)$$

was sich zu

$$\sum_j \frac{C_j d_j}{a_j^2} \epsilon_k a_k = \sum_{j \neq k} \frac{C_j d_j}{a_j^2} (a_j - a_k) \quad (7.16)$$

zusammenfassen läßt. Die Verspannung der k-ten Schicht ist dann gegeben durch

$$\epsilon_k = \frac{\sum_{j \neq k} \frac{C_j d_j}{a_j^2} (a_j - a_k)}{a_k \sum_j \frac{C_j d_j}{a_j^2}}. \quad (7.17)$$

Das Ersetzen mit Hilfe von Gleichung (7.11) resultiert in der sich einstellenden Gitterkonstante des Supergitters:

$$\begin{aligned} a^* &= \frac{\sum_{j \neq k} \frac{C_j d_j}{a_j^2} (a_j - a_k)}{\sum_j \frac{C_j d_j}{a_j^2}} + a_k = \frac{\sum_{j \neq k} \frac{C_j d_j}{a_j^2} a_j - \sum_{j \neq k} \frac{C_j d_j}{a_j^2} a_k + \sum_j \frac{C_j d_j}{a_j^2} a_k}{\sum_j \frac{C_j d_j}{a_j^2}} = \frac{\sum_{j \neq k} \frac{C_j d_j}{a_j^2} + \frac{C_k d_k}{a_k}}{\sum_j \frac{C_j d_j}{a_j^2}} \\ &= \frac{\sum_j \frac{C_j d_j}{a_j^2}}{\sum_j \frac{C_j d_j}{a_j^2}}. \end{aligned} \quad (7.18)$$

Mit dieser Kenntnis ist es nun leicht, die Verspannung der GaN- und AlN-Filme für die Supergitter anzugeben. Die Quantengraben von Probe BS7 (BS8) sind mit $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = -0,011$ ($-0,015$) stark kompressiv verspannt. Die AlN-Barrieren sind hingegen mit $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = 0,013$ ($0,009$) zugverspannt. Die immense Verspannung erhöht die GaN-Bandlücke um 93 (118) meV, während der Bandabstand von AlN um 437 (345) meV gesenkt wird. Die piezoelektrische Polarisierung ist nach den Gleichungen (3.13) und (3.14) zu berechnen. Unter Einbeziehung der spontanen Polarisierung ergeben sich Polarisationsflächenladungen in der Größenordnung von $6 \times 10^{13} \text{ e/cm}^2$ an den Grenzflächen.

Da jetzt die entscheidenden Größen bekannt sind, können die Bandkantenverläufe berechnet werden. Abbildung 7.33 vergleicht die Valenz- und die Leitungsbandkante der Proben BS7 und BS8 ohne angelegte äußere Spannung mit dem Flachbandfall für die Quantengraben. Um den Flachbandfall zu erreichen, müssen an Probe BS7 (BS8) $-2,43$ ($-2,35$) V pro Supergitterperiode (eine Barriere + ein Graben) angelegt werden.

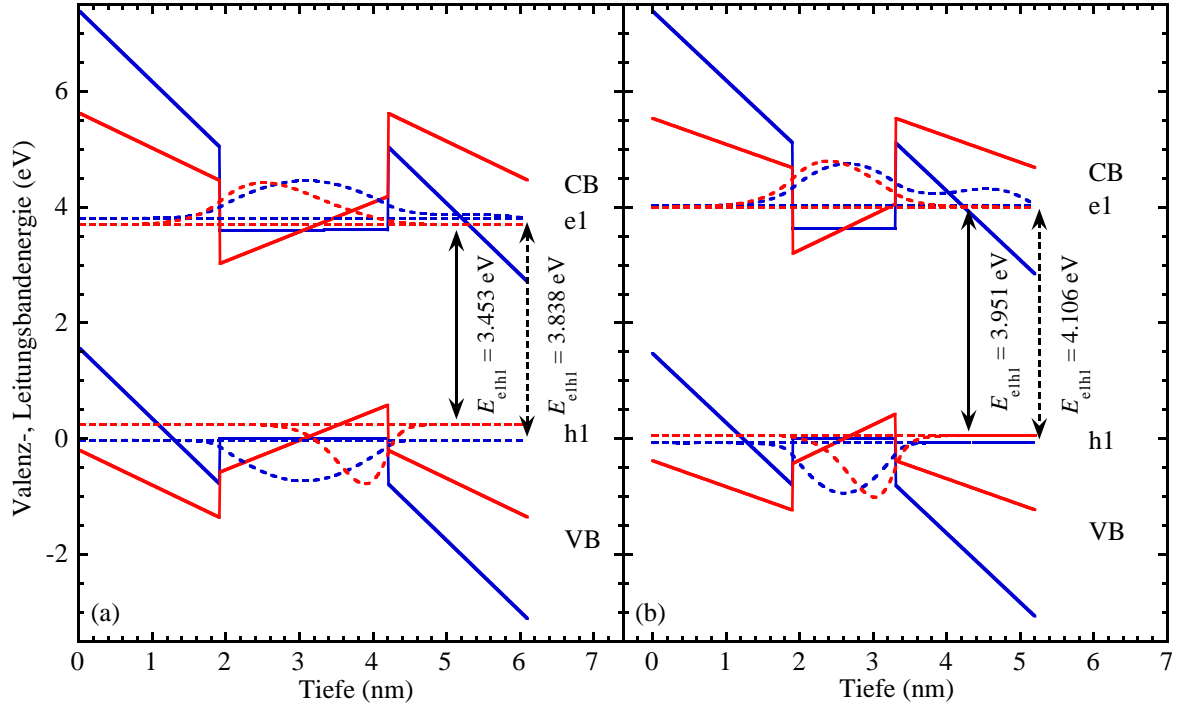


Abbildung 7.33: Verlauf von Valenz- und Leitungsband für Proben a) BS7 und b) BS8 mit Grundniveau der Elektronen und schweren Löcher sowie zugehöriger Wellenfunktion ohne angelegte Spannung (rot) und für Flachbandfall im Quantengraben (blau).

Bei dieser Spannung beträgt die Quantisierungsenergie für die Elektronen von Probe BS7 $\Delta E_e = 202 \text{ meV}$, die für die schweren Löcher $\Delta E_h = -31 \text{ meV}$. Dies ergibt eine e1h1-Übergangsenergie von $3,838 \text{ eV}$. Im spannungslosen Fall erreicht die polarisationsinduzierte elektrische Feldstärke im Graben F_w einen Wert von $5,07 \text{ MV/cm}$. Sie verschiebt das elektronische Subniveau um -110 meV sowie das Löcherniveau um $+276 \text{ meV}$. Somit sinkt die Übergangsenergie auf $3,453 \text{ eV}$. Die Abbildung läßt die räumliche Trennung der Wellenfunktion von Elektronen und Löchern erkennen, welche die Übergangswahrscheinlichkeit verringert und die sich abschwächende Amplitude der ER-Spektren bei steigender Gleichspannung erklärt. Ebenso ist zu sehen, daß sich die Wellenfunktion nur wenig in die Barriere ausdehnt und diese nicht zu durchdringen vermag. Das rechtfertigt die Beschränkung auf einen einzelnen Quantengraben, was den Rechenaufwand erheblich verringert.

Bei Probe BS8 dringt die WF der Elektronen zwar durch eine der beiden Barrieren hindurch, das geschieht jedoch nur für sehr große Spannungen, die im Experiment nicht

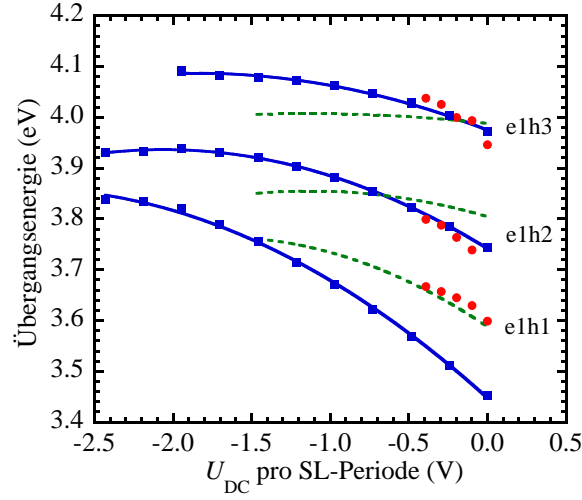


Abbildung 7.34: Vergleich der aus den ER-Spektren von Probe BS7 ermittelten Übergangsenergien (rot) mit Berechnungen für voll verspanntes (blau) bzw. unverspanntes Material (grün) in Abhängigkeit von der extern angelegten Gleichspannung, bezogen auf eine SL-Periode.

erreicht werden. Daher wird zur Vereinfachung auch hier nur ein einzelner Quantengraben betrachtet. Für diese Probe wurden Werte von $\Delta E_e = 402$ meV und $\Delta E_h = -73$ meV bestimmt. Wegen des geringeren Verhältnisses von d_w zu d_b , erreicht F_w hier bei $U_{dc} = 0$ sogar 6,11 MV/cm. Allerdings beträgt die Verschiebung durch den Quantenstarkeffekt nur -31 meV für die Elektronen bzw. $+123$ meV für die schweren Löcher. Dies liegt in der Tatsache begründet, daß die Energieverschiebung zwar proportional zum Quadrat der Feldstärke ist, jedoch auch proportional zur vierten Potenz der Quantengrabbendicke.

In Abbildung 7.34 werden die berechneten Übergangsenergien (blau) von Probe BS7 mit den ER-Resultaten (rot) verglichen. Die angegebenen extern angelegten Gleichspannungen sind dabei jeweils auf eine SL-Periode bezogen. Es fällt auf, daß die experimentell bestimmten Übergangsenergien des Grundzustandes 110-150 meV höher liegen als es die Theorie für ein vollständig verspanntes Supergitter dieser Abmessungen erwarten läßt. Die ER-Signale bei 3,8 und 4,0 eV sind allerdings eindeutig elh2 und elh3 zuzuordnen. Hier werden die Energiepositionen und die Spannungsabhängigkeit hervorragend reproduziert. Im Experiment ist kein Signal auflösbar, welches der berechneten elh1-Kurve entspricht. Dies ist nicht verwunderlich, bedenkt man, daß es in diesem Energiebereich zu einer Überlagerung mit dem starken Signal der GaN-Bandlücke kommt. Zweifel an der Richtigkeit der Rechnung können durch den Vergleich mit Experimenten anderer Gruppen ausgeräumt werden. Für 0 V wurde ein Abstand zwischen erstem und zweitem

7.3. ALN/GAN-SUPERGITTER

Elektronensubniveau von 682 meV berechnet. Untersuchungen an Strukturen ähnlicher Grabendicken mittels Intersubbandabsorption zeigen Werte zwischen 649 meV [139] und 730 meV [158] und bestätigen das hier berechnete Ergebnis.

Der Ursprung der zu hochenergetisch liegenden experimentellen Kurve in Abbildung 7.34 ist allerdings noch zu klären. Die Elektroreflexion ist wegen der Größe der Schottkykontakte und dem Lichtfleck mit einem Durchmesser von 0,5–1 mm keine räumlich hochauflösende Methode, sondern es wird stets über ein gewisses Areal der Probe gemittelt. Vergegenwärtigt man sich die Tatsache, daß die Proben aufgrund der großen Verspannungswerte Risse aufweisen, ist anzunehmen, daß die ER-Spektren anteilig durch intakte voll verspannte Gebiete sowie entspanntes Material in der Umgebung der Risse bestimmt sind. Die Rechnungen wurden daher für unverspanntes Material wiederholt und sind in Abbildung 7.34 grün dargestellt. Durch den Wegfall der Verspannung erhöht sich die Bandlücke der Barrieren, die der Gräben sinkt. Im Ergebnis erhält man eine geringere e1h1-Übergangsenergie für den Flachbandfall. Dieser wird bereits bei einer Spannung von -1,47 V pro SL-Periode erreicht. Das Fehlen der piezoelektrischen Polarisierung führt zu einer drastischen Verminderung der elektrischen Feldstärken. Im spannungslosen Fall findet man $F_w = 3,06$ MV/cm. Somit ist die Wirkung des Quantenstarkeffektes für relaxiertes Material spürbar geringer, was sich im kleineren Anstieg der grünen Kurven in Abbildung 7.34 widerspiegelt. Der erneute Vergleich mit dem Experiment erlaubt die eindeutige Zuordnung der zunächst ungeklärten roten Kurve zum e1h1-Übergang von unverspanntem Material. Man könnte erwarten, auch entsprechende höhere Übergänge in den Spektren wiederzufinden. In Bezug auf die Probenoberfläche beträgt der Anteil der Risse allerdings nur ca. 10%. Für e1h2 und e1h3 liegen die Übergänge von verspanntem und unverspanntem Material vergleichsweise dicht beisammen, so daß sie nicht getrennt auflösen sind und die Energieposition in der Anpassung der Spektren vom deutlich größeren verspannten Anteil bestimmt wird.

Für Probe BS8 sind Theorie und Experiment in ähnlicher Weise in Abbildung 7.35 gegenübergestellt. Der Abstand von e1 zu e2 beträgt im voll verspannten Zustand 957 meV. Literaturdaten von Experimenten an ähnlichen Strukturen zeigen Werte zwischen 816 meV und 976 meV [138, 139, 159–162]. Bei dieser Probe unterscheiden sich die Anstiege der blauen und grünen Kurven weniger, weil der Quantenstarkeffekt von d_w^4 abhängt. Für $\epsilon = 0$ wird hier im spannungslosen Fall eine elektrische Feldstärke von $F_w = 3,79$ MV/cm erreicht. Der Flachbandfall liegt bei $U_{dc} = -1,49$ V pro SL-Periode vor. Im Gegensatz zu Probe BS7 sind bei Probe BS8 die berechneten Energiepositionen mit und ohne Verspannung auch für den Grundzustand nah beieinander.

Betrachtet man die experimentellen Daten, so sind für den Grundzustandsübergang

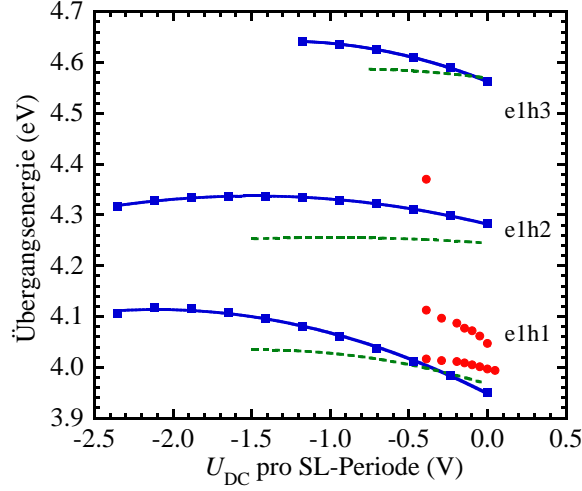


Abbildung 7.35: Vergleich der aus den ER-Spektren von Probe BS8 ermittelten Übergangsenergien (rot) mit Berechnungen für voll verspanntes (blau) bzw. unverspanntes Material (grün) in Abhängigkeit von der extern angelegten Gleichspannung, bezogen auf eine SL-Periode.

zwei Kurven zu sehen. Ihr Anstieg entspricht dem der berechneten Kurven für das voll bzw. nicht verspannte Schichtsystem. Fernab der störenden GaN-Bandkante sind für dieses Supergitter die Anteile aus beiden Bereichen der Probe detektierbar. Das schwache Signal in den ER-Spektren bei 4,37 eV stammt vom e1h2-Übergang. Es ist nur ein Datenpunkt bei der negativsten Spannung angegeben, da die Anpassung der Linienform aufgrund der geringen Amplitude fehlschlägt. Gemeinsames Merkmal aller experimentellen Daten dieser Probe ist ihre im Vergleich zur Theorie höherliegende Energieposition. Zusätzlich ist offenbar selbst für $U_{dc} = 0$ die verspannte Übergangsenergie (Kurve mit steilerem Anstieg) höher als die unverspannte (Kurve mit flachem Anstieg). Diese Fakten sind ein wichtiges Indiz dafür, daß die reale Quantengrabenbreite womöglich geringer ist als nominell angegeben. Eine kleinerer Wert von d_w würde die Quantisierungsenergien und außerdem durch das dann geringere Verhältnis von Graben- zu Barrierendicke die kompressive Verspannung der GaN-Filme ansteigen lassen. Dadurch werden die Bandlücke und ebenso die Übergangsenergien erhöht. Die ebenfalls ansteigende elektrische Feldstärke wirkt sich aber bei kleinen Dicken immer weniger aus. Die Energieerniedrigung durch den Quantenstarkeffekt verliert somit an Gewicht gegenüber der verspannungsbedingten Erhöhung, was letztendlich zu einem Vertauschen der energetischen Reihenfolge der blauen und grünen Kurve in der Abbildung führen kann. Die Vermutung einer abweichenden Schichtdicke wird sehr wahrscheinlich, wenn man bedenkt, daß eine Monolage GaN etwa

7.3. ALN/GAN-SUPERGITTER

0,259 nm dick ist. 5 bzw. 6 Monolagen entsprechen dann 1,30 und 1,55 nm. Die für Probe BS8 angegebenen 1,4 nm sind hingegen kein Vielfaches. Für Probe BS7 besteht ein solcher Widerspruch nicht, da 2,3 nm genau 9 Monolagen entsprechen.

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

Im Mittelpunkt dieser Arbeit stand die optische Charakterisierung von Nitridhalbleitern. Im ersten Teil wurde Volumenmaterial untersucht, wobei das Hauptaugenmerk auf der Bestimmung der anisotropen dielektrischen Funktion lag. Mittels spektroskopischer Ellipsometrie gelang an c -achsenorientierten Proben die Bestimmung der ordentlichen DF von $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ für $0 \leq x \leq 0,53$. Die Besonderheit dieser Arbeit ist der ausgedehnte Spektralbereich von 0,74–9,8 eV. Mit den erzielten Ergebnissen konnte eine analytische Beschreibung für die ordentliche DF von AlGa N für beliebige Zusammensetzungen gefunden werden. Im Modell sind sowohl der exzitronische Beitrag zur DF als auch Durchbiegungsparameter für die Entwicklung der Übergangsenergien, Amplituden und Verbreiterungen mit steigendem Al-Gehalt einbezogen.

Von besonderem Interesse sind Proben, deren c -Achse in der Wachstumsebene liegt, da bei derartigen Proben nicht nur die ordentliche, sondern ebenfalls die außerordentliche Komponente der DF im Experiment zugänglich ist. An GaN(11 $\bar{2}$ 0)-Proben wurde die anisotrope DF von GaN im Spektralbereich von 1,2–9,8 eV bestimmt. Die Daten sind nach Kenntnis des Autors einmalig, da bisher stets nur die pseudodielektrische DF publiziert wurde. Durch den Vergleich von ε_{\perp} und ε_{\parallel} läßt sich der deutliche Einfluß von höherenergetischen kritischen Punkten auf den Brechungsindex unterhalb der Bandkante ablesen. Die große Amplitude des außerordentlichen T_1 -Übergangs sorgt im gesamten niederenergetischen Spektralbereich für ein im Vergleich zu $\varepsilon_{1\perp}$ höheres $\varepsilon_{1\parallel}$. Somit wurde gezeigt, daß für eine Modellierung optischer Bauelemente wie z.B. Wellenleiterstrukturen die Berücksichtigung der Anisotropie unerläßlich ist.

Weiterhin konnte demonstriert werden, daß die optische Antwort von c -achsenorientiertem GaN fast vollständig durch die ordentliche DF bestimmt ist.

Für AlN reicht die momentane Datenlage bzw. die Qualität der Proben nicht aus, um die DF angeben zu können. Hier muß sich auf die Pseudo-DF beschränkt werden. Wie

bei GaN findet man einen im Vergleich zu E_1 stark überhöhten T_1 -Übergang, wodurch $\langle \varepsilon_{1\parallel} \rangle$ unterhalb von 7,5 eV größer ist als $\langle \varepsilon_{1\perp} \rangle$. Anhand der optischen Auswahlregeln bestätigt sich im Bereich der Bandkante die Annahme einer negativen Kristallfeldenergie. Die Bänderreihenfolge der oberen beiden Valenzbänder ist im Vergleich zu GaN vertauscht.

Um die vorgestellten Erkenntnisse der c -achsenorientierten Proben zu erweitern, sind Al-reiche $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Proben mit $x > 0.53$ notwendig. Bei a -achsenorientiertem Material ist zunächst die Datenlage für AlN zu verbessern, bevor man zu AlGaN-Verbindungen übergehen kann, um schließlich das entwickelte analytische Modell auf die außerordentliche Komponente der DF zu erweitern.

Im zweiten Teil der Arbeit wurden unterschiedliche Arten von Heterostrukturen, bestehend aus AlN, GaN und AlGaN, untersucht. Die Eigenschaften derartiger Proben werden maßgeblich von der Polarisierung der einzelnen Schichten beeinflusst. Die Aufteilung der resultierenden elektrischen Felder wird durch die Schichtdicken der einzelnen Filme bestimmt. Es konnte gezeigt werden, daß es mittels Spektrellipsometrienmessungen möglich ist, diese mit hinreichender Genauigkeit zu ermitteln. Die entscheidende Grundlage hierfür stellen die aus dem ersten Teil bekannten dielektrischen Funktionen dar. Die Modulationsspektroskopie ermöglichte es, die Ladungsträgerdichten zweidimensionaler Elektronengase zu bestimmen. Im Fall der ER ist dies sogar spannungsabhängig möglich. Aus der Schwellfeldstärke des 2DEG kann direkt auf den Polarisationsgradienten an der AlGaN/GaN-GF geschlossen werden. Durch das selbstkonsistente Lösen der Schrödinger- und der Poisson-Gleichung wurden die Bandkantenverläufe inklusive der Barrierenhöhen der Schottkykontakte (ER) bzw. der OF-Potentiale der freien Oberfläche (PR) berechnet. Es zeigt sich, daß durch das Aufbringen einer GaN-Deckschicht die Bandkante des AlGaN nach oben geschoben wird, was zu einer Verringerung der Flächenladungsdichte des 2DEG führt. Das OF-Potential von GaN ist mit ca. 0,3 eV deutlich niedriger als häufig in der Literatur angenommen wird. Das OF-Potential von AlGaN konnte mit einer nichtlinearen Formel abgeschätzt werden.

Für dicke GaN-Deckschichten wurde durch die Spannungsabhängigkeit der elektrischen Feldstärken in Deckschicht und Barriere die Koexistenz von zweidimensionalem Elektronen- und Löchergas an der AlGaN/GaN- bzw. der GaN/AlGaN-GF nachgewiesen. Mit den vorgestellten optischen Methoden die gleichzeitige Bestimmung der Konzentration beider Ladungsträgergase möglich, während das 2DHG für Hallmessungen nicht zugänglich ist.

Für AlN/GaN-Supergitter wurden mehrere Interbandübergänge detektiert, deren Zuordnung durch quantenmechanische Rechnungen erfolgte. Dabei zeigt sich, daß das Schichtdickenverhältnis von Quantengraben zu Barriere von wesentlicher Bedeutung ist,

weil sich daraus sowohl die Verspannung der Einzelfilme als auch die Verteilung der elektrischen Feldstärken ergibt. Das Wechselspiel aus Verspannung und Quantenstarkeffekt, welches im Experiment beobachtet wird, konnte in den Rechnungen reproduziert werden. Es gelang sogar die Separation von Beiträgen voll verspannter und vollständig relaxierter Gebiete der Proben zum Meßsignal. Mit Spektralellipsometrie wurde demonstriert, daß die DF der Supergitter bezüglich der generellen Linienform der von AlGa_N ähnelt. Die Energiepositionen der charakteristischen Extrema in den Spektren lassen jedoch erkennen, daß die DF auch weit oberhalb des Grundzustandsübergangs der Supergitter von Quanteneffekten dominiert wird. Am Γ -Punkt sind teilweise auch angeregte Zustände in der DF erkennbar.

Zusammengefaßt wurde in der Arbeit dargestellt, daß die Kombination aus Spektralellipsometrie und Modulationsspektroskopie die umfangreiche Charakterisierung von AlGa_N/Ga_N-Heterostrukturen sowie die Extraktion einer Vielzahl bauelementerelevanter Parameter erlaubt.

Für zukünftige Untersuchungen sollte bei einfachen AlGa_N/Ga_N-Strukturen der Bereich von Al-Gehalten erweitert werden, um die Genauigkeit der gefundenen $\phi_b(x)$ -Abhängigkeit zu erhöhen. Dabei ist allerdings die Beschränkung auf Bandlücken unterhalb der Anregungsenergie des Lasers zu beachten. Um die Betrachtungen der Ga_N/AlGa_N/Ga_N-Heterostrukturen zu vervollständigen, wären Deckschichten mittlerer Dicke wünschenswert. Hier wären bereits FKO für eine sichere Bestimmung von F_c detektierbar, aber es wäre noch kein 2DHG an der oberen GF vorhanden. Für Proben mit 2DHG müssen die Schrödinger-Poisson-Rechnungen erweitert werden. Hier genügt es nicht, sich auf ein einzelnes Leitungsband zu beschränken. Vielmehr sind die Valenzbänder in Form eines Multiband- $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Modells zu implementieren. Bei Supergittern können dickere AlGa_N-Deckschichten das Beobachten von FKO ermöglichen. Damit sind die elektrischen Feldstärken direkt bestimmbar und es wird eine höhere Zuverlässigkeit der Eingangsparameter in nachfolgenden Rechnungen erreicht. Durch die Beimengung von In in den Barrieren ist ein auf die Gitterkonstante von Ga_N angepaßtes Wachstum möglich. Dadurch entfällt der Einfluß von Verspannung, piezoelektrischer Polarisierung und etwaiger Rißbildung. Für die Übergangsenergien spielen dann nur noch die durch die spontane Polarisierung induzierten elektrischen Felder eine Rolle. Eine Verbesserung des Kenntnisstandes der effektiven Massen und Banddiskontinuitäten von Nitridhalbleitern fernab vom Γ -Punkt der Brillouinzone würde zum tieferen Verständnis der DF der Supergitter im hochenergetischen Spektralbereich beitragen.

Literaturverzeichnis

- [1] R. Goldhahn, C. Buchheim, P. Schley, A. T. Winzer, H. Wenzel, *Optical Constants of Bulk Nitrides*, in J. Piprek (Hg.), *Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulation*, 95–115 (Wiley-VCH, Weinheim, 2007)
- [2] R. Goldhahn, C. Buchheim, V. Lebedev, V. Cimalla, O. Ambacher, C. Cobet, M. Rakel, N. Esser, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, S. Potthast, D. J. As, *Dielectric function and critical points of the band structure for hexagonal and cubic GaN and AlN*, in K. Godehusen (Hg.), *BESSY Highlights 2004: Annual Report*, 206–208 (Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung m.b.H., 2005), ISSN-Nummer: 1611-6127
- [3] C. Buchheim, R. Goldhahn, M. Rakel, C. Cobet, N. Esser, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, *Dielectric function and critical points of the band structure for AlGaIn alloys*, phys. stat. sol. (b) **242**, 2610 (2005)
- [4] C. Buchheim, R. Goldhahn, A. T. Winzer, C. Cobet, M. Rakel, N. Esser, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, O. Ambacher, *Critical points of the bandstructure of AlN/GaN superlattices investigated by spectroscopic ellipsometry and modulation spectroscopy*, phys. stat. sol. (c) **3**, 2009 (2006)
- [5] C. Buchheim, R. Goldhahn, A. T. Winzer, G. Gobsch, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, F. Furtmayr, M. Eickhoff, *Stark shift of interband transitions in AlN/GaN superlattices*, Appl. Phys. Lett. **90**, 241906 (2007)
- [6] C. Buchheim, R. Goldhahn, G. Gobsch, K. Tonisch, V. Cimalla, F. Niebelschütz, O. Ambacher, *Electric field distribution in GaN/AlGaIn/GaN heterostructures with two-dimensional electron and hole gas*, Appl. Phys. Lett. **92**, 013510 (2008)
- [7] K. Tonisch, C. Buchheim, F. Niebelschütz, M. Donahue, R. Goldhahn, V. Cimalla, O. Ambacher, *Piezoelectric actuation of all-nitride MEMS*, phys. stat. sol. (c) **5**, 1910 (2008)
- [8] K. Tonisch, C. Buchheim, F. Niebelschütz, A. Schober, G. Gobsch, V. Cimalla, O. Ambacher, R. Goldhahn, *Piezoelectric actuation of (GaN/AlGaIn/GaN heterostructures*, J. Appl. Phys. **104**, 084516 (2008)
- [9] C. Buchheim, M. Röppischer, R. Goldhahn, G. Gobsch, C. Cobet, C. Werner, N. Esser, A. Dadgar, M. Wieneke, J. Bläsing, A. Krost, *Influence of anisotropic strain on excitonic transitions in a-plane GaN*, Microelectronics J. **40**, 322 (2009)
- [10] M. Röppischer, R. Goldhahn, C. Buchheim, F. Furtmayr, T. Wassner, M. Eickhoff, C. Cobet, N. Esser, *Analysis of polarization-dependent photoreflectance studies for c-plane GaN films on a-plane sapphire*, phys. stat. sol. (a) **206**, 773 (2009)

- [11] P. Waltereit, S. Müller, K. Bellmann, C. Buchheim, R. Goldhahn, K. Köhler, L. Kirste, M. Baeumler, M. Dammann, W. Bronner, R. Quay, O. Ambacher, *Impact of GaN thickness on optical, electrical, and device properties in AlGaIn/GaN high electron mobility transistor structures*, J. Appl. Phys. **106**, 023535 (2009)
- [12] K. Köhler, S. Müller, R. Aidam, P. Waltereit, W. Pletschen, L. Kirste, H. P. Menner, W. Bronner, A. Leuther, R. Quay, M. Mikulla, O. Ambacher, R. Granzner, F. Schwierz, C. Buchheim, R. Goldhahn, *Influence of the surface potential on electrical properties of $Al_xGa_{1-x}N$ /GaN heterostructures with different Al-content: Effect of growth method*, J. Appl. Phys. **107**, 053711 (2010)
- [13] P. Waltereit, W. Bronner, R. Quay, M. Damman, S. Müller, K. Köhler, M. Mikulla, O. Ambacher, L. Harm, M. Lorenzini, T. Rödle, K. Riepe, K. Bellmann, C. Buchheim, R. Goldhahn, *Development of rugged 2 GHz power bars delivering more than 100 W and 60% power added efficiency*, phys. stat. sol. (a) (eingereicht)
- [14] W. Pletschen, S. Müller, K. Köhler, R. Kiefer, L. Kirste, C. Buchheim, R. Goldhahn, R. Quay, M. Mikulla, O. Ambacher, *Influence of surface conditions on the properties of GaN/ $Al_xGa_{1-x}N$ HEMT structures*, phys. stat. sol. (c) (eingereicht)
- [15] S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, S. Nagahama, T. Yamada, T. Mukai, *Superbright Green InGaIn Single-Quantum-Well-Structure Light-Emitting Diodes*, Jpn. J. Appl. Phys. **34**, L1332 (1995)
- [16] T. Mukai, H. Narimatsu, S. Nakamura, *Amber InGaIn-Based Light-Emitting Diodes Operable at High Ambient Temperatures*, Jpn. J. Appl. Phys. **37**, L479 (1998)
- [17] S. Nakamura, G. Fasol, *The Blue Laser Diode* (Springer-Verlag, Heidelberg, 1997)
- [18] S. P. Denbaars, *Gallium-nitride-based materials for blue to ultraviolet optoelectronics devices*, Proc. IEEE **85**, 1740 (1997)
- [19] S. Nakamura, *Present Status of InGaIn-Based Laser Diodes*, phys. stat. sol. (a) **176**, 15 (1999)
- [20] T. Takeuchi, T. Detchprohm, M. Yano, M. Yamaguchi, N. Hayashi, M. Iwaya, K. Isomura, K. Kimura, H. Amano, I. Akasaki, Yw. Kaneko, S. Watanabe, Y. Yamaoka, R. Shioda, T. Hidaka, Ys. Kaneko, N. Yamada, *Fabrication and Characterization of GaIn-Based Laser Diode Grown on Thick n-AlGaIn Contact Layer*, phys. stat. sol. (a) **176**, 31 (1999)
- [21] M. Razeghi, A. Rogalski, *Semiconductor ultraviolet detectors*, J. Appl. Phys. **79**, 7433 (1996)
- [22] H. J. Looi, M. D. Whitfield, R. B. Jackman, *Metal-semiconductor-metal photodiodes fabricated from thin-film diamond*, Appl. Phys. Lett. **74**, 3332 (1999)
- [23] U. Karrer, A. Dobner, O. Ambacher, M. Stutzmann, *AlGaIn-based ultraviolet light detectors with integrated optical filters*, J. Vac. Sci. Technol. B **18**, 757 (2000)
- [24] T. Ive, O. Brandt, H. Kostial, T. Hesjedal, M. Ramsteiner, K. H. Ploog, *Crack-free and conductive Si-doped AlIn/GaN distributed Bragg reflectors grown on 6H-SiC(0001)*, Appl. Phys. Lett. **85**, 1970 (2004)
- [25] C. Gmachl, H. M. Ng, A. Y. Cho, *Intersubband absorption in degenerately doped GaIn/ $Al_xGa_{1-x}N$ coupled double quantum wells*, Appl. Phys. Lett. **79**, 1590 (2001)

LITERATURVERZEICHNIS

- [26] Y. Inoue, H. Nagasawa, N. Sone, K. Ishino, A. Ishida, H. Fujuyasu, J. J. Kim, H. Makino, T. Yao, S. Sakakibara, M. Kuwabara, *Fabrication and characterization of short period AlN/GaN quantum cascade laser structures*, J. Cryst. Growth **265**, 65 (2004)
- [27] A. Lloyd Spetz, A. Baranzahi, P. Tobias, I. Lundström, *High Temperature Sensors on Metal-Insulator-Silicon Carbide Devices*, phys. stat. sol. (a) **162**, 493 (1997)
- [28] A. Ozgur, W. Kim, Z. Fan, A. Botchkarev, A. Salvador, S. N. Mohammad, B. Sverdlov, H. Morkoç, *High transconductance normally-off GaN MODFETs*, Electron. Lett. **31**, 1389 (1995)
- [29] M. A. Khan, Q. Chen, J. W. Yang, M. S. Shur, B. T. Dermott, J. A. Higgins, *Microwave operation of GaN/AlGaIn-doped channel heterostructure field effect transistors*, IEEE Electron Dev. Lett. **17**, 325 (1996)
- [30] M. A. Khan, Q. Chen, M. S. Shur, B. T. Dermott, J. A. Higgins, J. Burm, W. J. Schaff, L. F. Eastman, *CW operation of short-channel GaN/AlGaIn doped channel heterostructure field effect transistors at 10 GHz and 15 GHz*, IEEE Electron Dev. Lett. **17**, 584 (1996)
- [31] Y. F. Wu, S. Keller, P. Kozodoy, B. P. Keller, P. Parikh, D. Kapolnek, S. P. Denbaars, U. K. Mishra, *Bias dependent microwave performance of AlGaIn/GaN MODFET's up to 100 V*, IEEE Electron Dev. Lett. **18**, 290 (1997)
- [32] S. C. Binari, J. M. Redwing, G. Kelner, W. Kruppa, *AlGaIn/GaN HEMTs grown on SiC substrates*, Electron. Lett. **33**, 242 (1997)
- [33] L. F. Eastman, V. Tilak, J. Smart, B. M. Green, E. M. Chumbs, R. Dimitrov, H. Kim, O. S. Ambacher, N. Weimann, T. Eruntty, M. Murphy, W. J. Schaff, J. R. Shealy, *Undoped AlGaIn/GaN HEMTs for microwave power amplification*, IEEE T. Electron. Dev. **48**, 479 (2001)
- [34] V. Kumar, W. Lu, F. A. Khan, R. Schwindt, A. Kuliev, G. Simin, J. Yang, M. A. Khan, I. Adesida, *High performance 0.25 μ m gate-length AlGaIn/GaN HEMTs on sapphire with transconductance of over 400 mS/mm*, Electron. Lett. **38**, 252 (2002)
- [35] M. Eickhoff, R. Neuberger, G. Steinhoff, O. Ambacher, G. Müller, M. Stutzmann, *Wetting Behaviour of GaN Surfaces with Ga- or N-Face Polarity*, phys. stat. sol. (b) **228**, 519 (2001)
- [36] C. Buchheim, G. Kittler, V. Cimalla, V. Lebedev, M. Fischer, S. Krischok, V. Yanev, G. Ecke, J. A. Schaefer, O. Ambacher, *Surface modifications of AlGaIn/GaN sensors for water based nano- and picodroplets*, Sensors 2004, Proc. IEEE **2**, 1007 (2004)
- [37] C. Buchheim, G. Kittler, V. Cimalla, V. Lebedev, M. Fischer, S. Krischok, V. Yanev, M. Himmerlich, G. Ecke, J. A. Schaefer, O. Ambacher, *Tuning of Surface Properties of AlGaIn/GaN Sensors for Nanodroplets and Picodroplets*, IEEE Sensors J. **6**, 881 (2006)
- [38] M. Stutzmann, J. A. Garrido, M. Eickhoff, M. S. Brandt, *Direct biofunctionalization of semiconductors: A survey*, phys. stat. sol. (a) **203**, 3424 (2006)
- [39] B. Lübbers, G. Kittler, P. Ort, S. Linkohr, D. Wegener, B. Baur, M. Gebinoga, F. Weise, M. Eickhoff, S. Maroldt, A. Schober, O. Ambacher, *A novel GaN-based multiparameter sensor system for biochemical analysis*, phys. stat. sol. (c) **5**, 2361 (2008)

- [40] G. Steinhoff, B. Baur, G. Wrobel, S. Ingebrandt, A. Offenhäuser, A. Dadgar, A. Krost, M. Stutzmann, M. Eickhoff, *Recording of cell action potentials with AlGaN/GaN field-effect transistors*, Appl. Phys. Lett. **86**, 033901 (2005)
- [41] B. S. Kang, H. T. Wang, F. Ren, S. J. Pearton, *Electrical detection of biomaterials using AlGaN/GaN high electron mobility transistors*, J. Appl. Phys. **104**, 031101 (2008)
- [42] G. F. Neumark, I. L. Kuskovsky, H. Jiang (Hg.), *Wide Bandgap Light Emitting Materials and Devices* (Wiley-VCH, Weinheim, 2007)
- [43] J. Piprek (Hg.), *Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulation* (Wiley-VCH, Weinheim, 2007)
- [44] C. Wood, D. Jena (Hg.), *Polarization Effects in Semiconductors: From Ab Initio Theory to Device Applications* (Springer US, New York, 2008)
- [45] R. Quay, *Gallium Nitride Electronics* (Springer, Berlin, 2008)
- [46] S. Shokhovets, R. Goldhahn, G. Gobsch, S. Piekh, R. Lantier, A. Rizzi, V. Lebedev, W. Richter, *Determination of the anisotropic dielectric function for wurtzite AlN and GaN by spectroscopic ellipsometry*, J. Appl. Phys. **94**, 307 (2003)
- [47] C. H. Yan, H. Yao, J. M. Van Hove, A. M. Wowchak, P. P. Chow, J. M. Zavada, *Ordinary optical dielectric functions of anisotropic hexagonal GaN film determined by variable angle spectroscopic ellipsometry*, J. Appl. Phys. **88**, 3463 (2000)
- [48] G. L. Bir, G. E. Pikus, *Symmetry and Strain Induced Effects in Semiconductors* (Wiley, New York, 1974)
- [49] S. L. Chuang, C. S. Chang, *$k \cdot p$ method for strained wurtzite semiconductors*, Phys. Rev. B **54**, 2491 (1996)
- [50] M. Suzuki, T. Uenoyama, A. Yanase, *First-principles calculations of effective-mass parameters of AlN and GaN*, Phys. Rev. B **52**, 8132 (1995)
- [51] B. Gil, O. Briot, R.-L. Aulombard, *Valence-band physics and the optical properties of GaN epilayers grown onto sapphire with wurtzite symmetry*, Phys. Rev. B **52**, R17028 (1995)
- [52] B. Gil, *Gallium Nitride II*, Semiconductors and Semimetals **57**, 209 (Academic Press, San Diego, 1999)
- [53] A. V. Rodina, M. Dietrich, A. Göldner, L. Eckey, A. Hoffmann, Al. L. Efros, M. Rosen, B. K. Meyer, *Free excitons in wurtzite GaN*, Phys. Rev. B **64**, 115204 (2001)
- [54] S.-H. Wei, A. Zunger, *Valence band splittings and band offsets of AlN, GaN, and InN*, Appl. Phys. Lett. **69**, 2719 (1996)
- [55] P. Carrier, S. H. Weih, *Theoretical study of the band-gap anomaly of InN*, J. Appl. Phys. **97**, 033707 (2005)
- [56] L. Chen, B. J. Skromme, R. F. Dalmau, R. schlessner, Z. Sitar, C. Chen, W. Sun, J. Yang, M. A. Khan, M. L. Nakarmi, J. Y. Lin, H.-X. Jiang, *Band-edge exciton states in AlN single crystals and epitaxial layers*, Appl. Phys. Lett. **85**, 4334 (2004)
- [57] A. Polian, M. Grimsditch, I. Grzegory, *Elastic constants of gallium nitride*, J. Appl. Phys. **79**, 3343 (1996)

LITERATURVERZEICHNIS

- [58] A. F. Wright, *Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN*, J. Appl. Phys. **82**, 2833 (1997)
- [59] A. Alemu, B. Gil, M. Julier, *Optical properties of wurtzite GaN epilayers grown on A-plane sapphire*, Phys. Rev. B **57**, 3761 (1998)
- [60] S. Ghosh, P. Waltereit, O. Brandt, H. T. Grahn, K. H. Ploog, *Electronic band structure of wurtzite GaN under biaxial strain in the M plane investigated with photoreflectance spectroscopy*, Phys. Rev. B **65**, 075202 (2002)
- [61] J.-M. Wagner, F. Bechstedt, *Properties of strained wurtzite GaN and AlN: Ab initio studies*, Phys. Rev. B **66**, 115202 (2002)
- [62] K. Shimada, T. Sota, K. Suzuki, *First-principles study on electronic and elastic properties of BN, AlN, and GaN*, J. Appl. Phys. **84**, 4951 (1998)
- [63] K. Kornitzer, T. Ebner, K. Thonke, R. Sauer, C. Kirchner, V. Schwegler, M. Kamp, M. Leszczynski, I. Grzegory, S. Porowski, *Photoluminescence and reflectance spectroscopy of excitonic transitions in high-quality homoepitaxial GaN films*, Phys. Rev. B **60**, 1471 (1999)
- [64] J. A. Freitas, W. J. Moore, B. V. Shanabrook, G. C. B. Braga, S. K. Lee, S. S. Park, J. Y. Han, *Donor-related recombination processes in hydride-vapor-phase epitaxial GaN*, Phys. Rev. B **66**, 233311 (2001)
- [65] M. Röppischer, *Einfluss anisotroper Verspannung auf die optischen Eigenschaften von epitaktischen GaN- und ZnO-Schichten*, Diplomarbeit, Technische Universität Ilmenau (2007)
- [66] F. Bernardini, V. Fiorentini, *Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides*, Phys. Rev. B **56**, R10024 (1997)
- [67] A. Zoroddu, F. Bernardini, P. Ruggerone, V. Fiorentini, *First-principles prediction of structure, energetics, formation enthalpy, elastic constants, polarization, and piezoelectric constants of AlN, GaN, and InN: Comparison of local and gradient-corrected density-functional theory*, Phys. Rev. B **64**, 45208 (2001)
- [68] W. Qian, M. Skowronski, G. R. Rohrer, *Structural defects and their relationship to nucleation of GaN films*, Band 423 von *Mat. Res. Soc. Proc.*, 475–486 (Pittsburg, PA, 1996)
- [69] V. Bougrov, M. E. Levinshstein, S. L. Rumyantsev, A. Zubrilov, *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*, 1–30 (Wiley, New York, 2001)
- [70] Y. Goldberg, *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*, 31–47 (Wiley, New York, 2001)
- [71] M. Leszczynski, H. Teisseyre, T. Suski, I. Grzegory, M. Bockowski, J. Jun, S. Porowski, K. Pakula, J. M. Baranowski, C. T. Foxon, T. S. Cheng, *Lattice parameters of gallium nitride*, Appl. Phys. Lett. **69**, 73 (1996)
- [72] H. Angerer, D. Brunner, F. Freudenberger, O. Ambacher, M. Stutzmann, R. Höpler, T. Metzger, E. Born, G. Dollinger, A. Bergmaier, S. Karsch, H.-J. Körner, *Determination of the Al mole fraction and the band gap bowing of epitaxial $Al_xGa_{1-x}N$ films*, Appl. Phys. Lett. **71**, 1504 (1997)

- [73] O. Ambacher, J. Majewski, C. Miskys, A. Link, M. Hermann, M. Eickhoff, M. Stutzmann, F. Bernardini, V. Fiorentini, V. Tilak, B. Schaff, L. F. Eastman, *Pyroelectric properties of Al(In)Ga_N/Ga_N hetero- and quantum well structures*, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 3399 (2002)
- [74] F. Bernardini, V. Fiorentini, *Nonlinear macroscopic polarization in III-V nitride alloys*, Phys. Rev. B **64**, 85207 (2001)
- [75] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, *Band parameters for nitrogen-containing semiconductors*, J. Appl. Phys. **94**, 3675 (2003)
- [76] A. T. Winzer, *Optische und elektronische Eigenschaften von AlGa_N/Ga_N-Heterostrukturen*, Dissertation, Technische Universität Ilmenau (2008)
- [77] J. P. Ibbetson, P. T. Fini, K. D. Ness, S. P. DenBaars, J. S. Speck, U. K. Mishra, *Polarization effects, surface states, and the source of electrons in AlGa_N/Ga_N heterostructure field effect transistors*, Appl. Phys. Lett. **77**, 250 (2000)
- [78] B. Johs, *Regression calibration method for rotating element ellipsometers*, Thin Solid Films **234**, 395 (1993)
- [79] B. O. Seraphin, N. Bottka, *Franz-Keldysh effect of the refractive index in semiconductors*, Phys. Rev. **139**, A560 (1965)
- [80] B. O. Seraphin, N. Bottka, *Band structure analysis from electroreflectance studies*, Phys. Rev. **145**, 628 (1966)
- [81] J. E. Rowe D. E. Aspnes, *Asymptotic convolution integral for electric field effects on the interband dielectric function*, Solid State Commun. **8**, 1145 (1970)
- [82] D. E. Aspnes, J. E. Rowe, *Resonant Nonlinear Optical Susceptibility: Electroreflectance in the Low-Field Limit*, Phys. Rev. B **5**, 4022 (1972)
- [83] D. F. Blossey, *Wannier Exciton in an Electric Field. I. Optical Absorption by Bound and Continuum States*, Phys. Rev. B **2**, 3976 (1970)
- [84] D. F. Blossey, *Wannier Exciton in an Electric Field. II. Electroabsorption in Direct-Band-Gap Solids*, Phys. Rev. B **3**, 1382 (1971)
- [85] W. Franz, *Influence of an electric field on an optical absorption edge*, Z. Naturforsch. **13a**, 484 (1958)
- [86] L. V. Keldysh, *Effect of a strong electric field on the optical properties of insulating crystals*, Sov. Phys. - JETP **34**, 788 (1958)
- [87] D. E. Aspnes, N. Bottka, *Modulation Techniques*, Band 9 von *Semiconductors and Semimetals*, Kapitel Electric-Field Effects on the Dielectric Function of Semiconductors and Insulators, 457 (Academic Press, New York, 1972)
- [88] M. Cardona, *Modulation Spectroscopy*, Solid State Physics, Suppl. 11, 55 ff. (Academic, New York, 1969)
- [89] J. P. Estrera, W. M. Duncan, R. Glosser, *Complex Airy analysis of photorefectance spectra for III-V semiconductors*, Phys. Rev. B **49**, 7281 (1994)

LITERATURVERZEICHNIS

- [90] D. E. Aspnes, *Band nonparabolicities, broadening, and internal field distributions: The spectroscopy of Franz-Keldysh oscillations*, Phys. Rev. B **10**, 4228 (1974)
- [91] U. Rossow, F. Hitzel, N. Riedel, S. Lahmann, J. Bläsing, A. Krost, G. Ade, P. Hinze, A. Hangleiter, *Influence of low-temperature interlayers on strain and defect density of epitaxial GaN layers*, J. Cryst. Growth **248**, 528 (2003)
- [92] U. Rossow, D. Fuhrmann, M. Greve, J. Bläsing, A. Krost, G. Ecke, N. Riedel, A. Hangleiter, *Growth of $Al_xGa_{1-x}N$ -layers on planar and patterned substrates*, J. Cryst. Growth **272**, 506 (2004)
- [93] M. Lucht, M. Lerche, H.-C. Wille, Y. V. Shvyd'ko, H. D. Rüter, E. Gerdau, P. Becker, *Precise measurement of the lattice parameters of $\alpha-Al_2O_3$ in the temperature range 4.5–250 K using the Mössbauer wavelength standard*, J. Appl. Cryst. **36**, 1075 (2003)
- [94] C. Roder, S. Einfeldt, S. Figge, D. Hommel, *Temperature dependence of the thermal expansion of GaN*, Phys. Rev. B **72**, 085218 (2005)
- [95] A. Dadgar, J. Bläsing, A. Diez, A. Alam, M. Heuken, A. Krost, *Metalorganic Chemical Vapor Phase Epitaxy of Crack-Free GaN on Si(111) Exceeding $1\mu m$ in Thickness*, Jpn. J. Appl. Phys. **39**, L1183 (2000)
- [96] J. Bläsing, A. Reiher, A. Dadgar, A. Diez, A. Krost, *The origin of stress reduction by low-temperature AlN interlayers*, Appl. Phys. Lett. **81**, 2722 (2002)
- [97] N. A. Papanicolaou, A. Edwards, M. V. Rao, J. Mittereder, W. T. Anderson, *Cr/Al and Cr/Al/Ni/Au ohmic contacts to n-type GaN*, J. Appl. Phys. **87**, 380 (2000)
- [98] D. Qiao, L. S. Yu, L. Jia, P. M. Asbeck, S. S. Lau, T. E. Haynes, *Transport properties of the advancing interface ohmic contact to AlGaIn/GaN heterostructures*, Appl. Phys. Lett. **80**, 992 (2002)
- [99] S. Murai, H. Masuda, Y. Koide, M. Murakami, *Effect of Pd or Pt addition to Ti/Al ohmic contact materials for n-type AlGaIn*, Appl. Phys. Lett. **80**, 2934 (2002)
- [100] A. N. Bright, P. J. Thomas, M. Weyland, D. M. Tricker, C. J. Humphreys, R. Davies, *Correlation of contact resistance with microstructure for Au/Ni/Al/Ti/AlGaIn/GaN ohmic contacts using transmission electron microscopy*, J. Appl. Phys. **89**, 3143 (2001)
- [101] M. W. Fay, G. Moldovan, P. D. Brown, I. Harrison, J. C. Birbeck, B. T. Hughes, M. J. Uren, T. Martin, *Structural and electrical characterization of AuTiAlTi/AlGaIn/GaN ohmic contacts*, J. Appl. Phys. **92**, 94 (2002)
- [102] A. Motayed, R. Bathe, M. C. Wood, O. S. Diouf, R. D. Vispute, S. N. Mohammad, *Electrical, thermal and microstructural characteristics of Ti/Al/Ti/Au multilayer Ohmic contacts to n-type GaIn*, J. Appl. Phys. **93**, 1087 (2003)
- [103] J. Chen, D. G. Ivey, J. Bardwell, Y. Liu, H. Tang, J. B. Webb, *Microstructural analysis of Ti/Al/Ti/Au ohmic contacts to n-AlGaIn/GaN*, J. Vac. Sci. Technol. A **20**, 1004 (2002)
- [104] A. C. Schmitz, A. T. Ping, M. Asif Khan, Q. Chen, J. W. Yang, I. Adesida, *Schottky barrier properties of various metals on n-type GaIn*, Semicond. Sci. Technol. **11**, 1464 (1996)
- [105] A. C. Schmitz, A. T. Ping, M. Asif Khan, Q. Chen, J. W. Yang, I. Adesida, *Metal Contacts to n-Type GaIn*, J. Electronic Materials **27**, 255 (1998)

- [106] Y.-J. Lin, *Electronic transport and Schottky barrier heights of Pt/n-type GaN Schottky diodes in the extrinsic region*, J. Appl. Phys. **106** (2009)
- [107] A. Dadgar, A. Krost, J. Christen, B. Bastek, F. Bertram, A. Krtschil, T. Hempel, J. Bläsing, U. Haboeck, A. Hoffmann, *MOVPE growth of high-quality AlN*, J. Cryst. Growth **297**, 306 (2006)
- [108] A. T. Winzer, R. Goldhahn, G. Gobsch, A. Dadgar, A. Krost, O. Weidemann M. Stutzmann, M. Eickhoff, *Electroreflectance spectroscopy of Pt/AlGaIn/GaN heterostructures exposed to gaseous hydrogen*, Appl. Phys. Lett. **88**, 024101 (2006)
- [109] A. B. Djurišić, Y. Chan, E. H. Li, *Novel model for the optical function of GaN*, Appl. Phys. A **74**, 669 (2002)
- [110] T. Wethkamp, K. Wilmers, N. Esser, W. Richter, O. Ambacher, H. Angerer, G. Jungk, R. L. Johnson, M. Cardona, *Spectroscopic ellipsometry measurements of $Al_xGa_{1-x}N$ in the energy range 3–25 eV*, Thin Solid Films **313–314**, 745 (1998)
- [111] C. Cobet, N. Esser, J. T. Zettler, W. Richter, P. Waltereit, Brandt O, K. H. Ploog, S. Peters, N. V. Edwards, O. P. A. Lindquist, M. Cardona, *Optical properties of wurtzite $Al_xGa_{1-x}N$ ($x < 0.1$) parallel and perpendicular to the c axis*, Phys. Rev. B **64**, 165203 (2001)
- [112] A. Cingolani, M. Ferrara, M. Lugarà, G. Scamarcio, *First order Raman scattering in GaN*, Solid State Commun. **58**, 823 (1986)
- [113] T. Klein, *Modulationsspektroskopie an GaN und AlGaIn/GaN-Heterostrukturen*, Diplomarbeit, Technische Universität Ilmenau (2006)
- [114] C. M. Herzinger, B. D. Johs, *Dielectric function parametric model, and method of use*, US Patent Nr. 5796983 (1998)
- [115] B. Johs, C. M. Herzinger, J. H. Dinan, A. Cornfeld, J. D. Benson, *Development of a parametric optical constant model for $Hg_{1-x}Cd_xTe$ for control of composition by spectroscopic ellipsometry during MBE growth*, Thin Solid Films **313–314**, 137 (1998)
- [116] Y. W. Jung, T. J. Kim, J. J. Yoon, Y. D. Kim, D. E. Aspnes, *Model dielectric functions for $Al_xGa_{1-x}As$ alloys of arbitrary compositions*, J. Appl. Phys. **104**, 013515 (2008)
- [117] J. Wagner, H. Obloh, M. Kunzer, M. Maier, K. Köhler, *Dielectric function spectra of GaN, AlGaIn and GaN/AlGaIn heterostructures*, J. Appl. Phys. **89**, 2779 (2001)
- [118] M. Baeumler, S. Müller, K. Köhler, J. Wagner, *Assessment of layer composition and thickness in AlGaIn/GaN HEMT structures by spectroscopic ellipsometry*, phys. stat. sol. (a) **202**, 665 (2005)
- [119] N. A. Sanford, L. H. Robins, A. V. Davydov, A. Shapiro, D. V. Tsvetkov, A. V. Dmitriev, S. Keller, U. K. Mishra, S. P. DenBaars, *Refractive index study of $Al_xGa_{1-x}N$ films grown on sapphire substrates*, J. Appl. Phys. **94**, 2980 (2003)
- [120] N. Teofilov, K. Thonke, R. Sauer, L. Kirste, D. G. Ebeling, K. W. Benz, *Optical investigation of $Al_xGa_{1-x}N$ epitaxial films grown on AlN buffer layers*, Diam. Rel. Mater. **11**, 892 (2002)

LITERATURVERZEICHNIS

- [121] T. Wethkamp, K. Wilmers, C. Cobet, N. Esser, W. Richter, O. Ambacher, M. Stutzmann, M. Cardona, *Dielectric function of hexagonal AlN films determined by spectroscopic ellipsometry in the vacuum-uv spectral range*, Phys. Rev. B **59**, 1845 (1999)
- [122] D. Fritsch, H. Schmidt, M. Grundmann, *Band-structure pseudopotential calculation of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN*, Phys. Rev. B **67**, 235205 (2003)
- [123] A. B. Djurišić, E. H. Li, *III-Nitride Semiconductors: Optical Properties II*, Band 14 von *Optoelectronic Properties of Semiconductors and Superlattices*, S. 115 (Taylor and Francis Books, New York, 2002)
- [124] S. Shokhovets, G. Gobsch, O. Ambacher, *Momentum matrix element and conduction band nonparabolicity in wurtzite GaN*, Appl. Phys. Lett. **86**, 161908 (2005)
- [125] C. Cobet, *Linear optical properties of III-nitride semiconductors between 3 and 30 eV*, Dissertation, Technische Universität Berlin (2005)
- [126] P. Misra, Y. J. Sun, O. Brandt, H. T. Grahn, *Polarization filtering by nonpolar M-plane GaN films on LiAlO₂*, J. Appl. Phys. **96**, 7029 (2004)
- [127] L. X. Benedict, E. L. Shirley, *Ab initio calculation of $\epsilon_2(\omega)$ including the electron-hole interaction: Application to GaN and CaF₂*, Phys. Rev. B **59**, 5441 (1999)
- [128] L. X. Benedict, T. Wethkamp, K. Wilmers, C. Cobet, N. Esser, E. L. Shirley, W. Richter, M. Cardona, *Dielectric function of wurtzite GaN and AlN thin films*, Solid State Commun. **112**, 129 (1999)
- [129] W. R. L. Lambrecht, B. Segall, J. Rife, W. R. Hunter, D. K. Wickenden, *UV reflectivity of GaN: Theory and experiment*, Phys. Rev. B **51**, 13516 (1995)
- [130] W. R. L. Lambrecht, M. Prikhodko, *Anisotropy of UV-reflectivity in wurtzite crystals: a comparison between GaN and CdSe*, Solid State Commun. **121**, 549 (2002)
- [131] V. Y. Davydov, I. N. Goncharuk, A. N. Smirnov, A. E. Nikolaev, W. V. Lundin, A. S. Usikov, A. A. Klochikhin, J. Aderhold, J. Graul, O. Semchinova, H. Harima, *Composition dependence of optical phonon energies and Raman line broadening in hexagonal Al_xGa_{1-x}N alloys*, Phys. Rev. B **65**, 125203 (2002)
- [132] M. Stutzmann, G. Steinhoff, M. Eickhoff, O. Ambacher, C. E. Nebel, J. Schalwig, R. Neuberger, G. Müller, *GaN-based heterostructures for sensor applications*, Diamond Relat. Mater. **11**, 886 (2002)
- [133] C. Buchheim, A. T. Winzer, R. Goldhahn, G. Gobsch, O. Ambacher, A. Link, M. Eickhoff, M. Stutzmann, *Photoreflectance studies of (Al)Ga- and N-face AlGa_N/GaN heterostructures*, Thin Solid Films **450**, 155 (2004)
- [134] G. Martin, S. Strite, A. Botchkarev, A. Agarwal, A. Rockett, H. Morkoç, W. R. L. Lambrecht, B. Segall, *Valence-band discontinuity between GaN and AlN measured by x-ray photoemission spectroscopy*, Appl. Phys. Lett. **65**, 610 (1994)
- [135] G. Martin, A. Botchkarev, A. Rockett, H. Morkoç, *Valence-band discontinuities of wurtzite GaN, AlN and InN heterojunctions measured by x-ray photoemission spectroscopy*, Appl. Phys. Lett. **68**, 2541 (1996)

- [136] S. h. Ke, K. m. Zhang, X. d. Xie, *Valence-band offsets and different band-gap behaviors of $(\beta\text{-GaN})/(\beta\text{-AlN})$ superlattice and $(\alpha\text{-GaN})/(\alpha\text{-AlN})$ superlattice*, J. Appl. Phys. **80**, 2918 (1996)
- [137] S.-H. Wei, A. Zunger, *Calculated natural band offsets of all II-VI and III-V semiconductors: Chemical trends and the role of cation d orbitals*, Appl. Phys. Lett. **72**, 2011 (1998)
- [138] K. Kishino, A. Kikuchi, H. Kanazawa, T. Tachibana, *Intersubband transition in $(\text{GaN})_m/(\text{AlN})_n$ superlattices in the wavelength range from 1.08 to 1.61 μm* , Appl. Phys. Lett. **81**, 1234 (2002)
- [139] M. Tchernycheva, L. Nevou, L. Doyennette, F. H. Julien, E. Warde, F. Guillot, E. Monroy, E. Bellet-Amalric, *Systematic experimental and theoretical investigation of intersubband absorption in GaN/AlN quantum wells*, Phys. Rev. B **73**, 125347 (2006)
- [140] P. K. Kandaswamy, F. Guillot, E. Bellet-Amalric, E. Monroy, L. Nevou, M. Tchernycheva, A. Michon, F. H. Julien, E. Baumann, F. R. Giogetta, D. Hofstetter, T. Remmele, M. Albrecht, S. Birner, L. S. Dang, *GaN/AlN short-period superlattices for intersubband optoelectronics: A systematic study of their epitaxial growth, design and performance*, J. Appl. Phys. **104**, 093501 (2008)
- [141] S. Barker Jr., M. Ilegems, *Infrared Lattice Vibrations and Free-Electron Dispersion in GaN*, Phys. Rev. B **7**, 743 (1973)
- [142] A. T. Winzer, R. Goldhahn, G. Gobsch, A. Link, M. Eickhoff, U. Rossow, A. Hangleiter, *Determination of the polarization discontinuity at the AlGaIn/GaN interface by electoreflectance spectroscopy*, Appl. Phys. Lett. **86**, 181912 (2005)
- [143] A. T. Winzer, R. Goldhahn, C. Buchheim, O. Ambacher, A. Link, M. Stutzmann, Y. Smorchkova, U. K. Mishra, J. S. Speck, *Photoreflectance studies of N- and Ga-face AlGaIn/GaN heterostructures confining a polarisation induced 2DEG*, phys. stat. sol. (b) **240**, 380 (2003)
- [144] G. Koley, M. G. Spencer, *Surface potential measurements on GaN and AlGaIn/GaN heterostructures by scanning Kelvin probe microscopy*, J. Appl. Phys. **90**, 337 (2001)
- [145] S. Heikman, S. Keller, Y. Wu, J. S. Speck, S. P. DenBaars, U. K. Mishra, *Polarization effects in AlGaIn/GaN and GaN/AlGaIn/GaN heterostructures*, J. Appl. Phys. **93**, 10114 (2003)
- [146] S.-J. Cho, S. Doğan, S. Sabuktagin, M. A. Reshchikov, D. K. Johnstone, H. Morkoç, *Surface band bending in as-grown and plasma-treated n-type GaN films using surface potential electric force microscopy*, Appl. Phys. Lett. **84**, 3070 (2004)
- [147] B. Jogai, *Free electron distribution in AlGaIn/GaN heterojunction field-effect transistors*, J. Appl. Phys. **91**, 3721 (2002)
- [148] B. Jogai, *Parasitic Hole Channels in AlGaIn/GaN Heterojunction Structures*, phys. stat. sol. (b) **233**, 506 (2002)
- [149] B. Jogai, *Influence of surface states on the two-dimensional electron gas in AlGaIn/GaN heterojunction field-effect transistors*, J. Appl. Phys. **93**, 1631 (2003)
- [150] B. Jogai, J. D. Albrecht, E. Pan, *Effect of electromechanical coupling on the strain in AlGaIn/GaN heterojunction field effect transistors*, J. Appl. Phys. **94**, 3984 (2003)

LITERATURVERZEICHNIS

- [151] M. Koçan, A. Rizzi, H. Lüth, S. Keller, U. K. Mishra, *Surface Potential at as-Grown GaN(0001) MBE Layers*, phys. stat. sol. (b) **234**, 773 (2002)
- [152] A. Rizzi, M. Kocan, J. Malindretos, A. Schildknecht, N. Teofilov, K. Thonke, R. Sauer, *Surface and interface electronic properties of AlGa_N(0001) epitaxial layers*, Appl. Phys. A **87**, 505 (2007)
- [153] R. Gutt, P. Lorenz, K. Tonisch, M. Himmerlich, J. A. Schaefer, S. Krischok, *Electronic structure of GaN(0001)-2 × 2 thin films grown by PAMBE*, phys. stat. sol (RRL) **2**, 212 (2008)
- [154] D. Segev, C. G. Van de Walle, *Origins of Fermi-level pinning on GaN and InN polar and nonpolar surfaces*, Europhys. Lett. **76**, 305 (2006)
- [155] A. T. Winzer, G. Gobsch, R. Goldhahn, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, A. Dadgar, A. Krost, *Influence of excitons and electric fields on the dielectric function of GaN: Theory and experiment*, Phys. Rev. B **74**, 125207 (2006)
- [156] R. Goldhahn, A. T. Winzer, A. Dadgar, A. Krost, O. Weidemann, M. Eickhoff, *Modulation spectroscopy of AlGa_N/Ga_N heterostructures: The influence of electron-hole interaction*, phys. stat. sol (a) **204**, 447 (2007)
- [157] B. K. Ridley, W. J. Schaff, L. F. Eastman, *Theoretical model for polarization superlattices: Energy levels and intersubband transitions*, J. Appl. Phys. **94**, 3972 (2003)
- [158] X. Liu, T. Aggerstam, P. Jänes, P. Holmström, S. Lourdudoss, L. Thyle'n, T. Andersson, *Investigation of intersubband absorption in GaN/AlN multiple quantum wells grown on different substrates by molecular beam epitaxy*, J. Cryst. Growth **301–302**, 457 (2007)
- [159] C. Gmachl, H. M. Ng, S.-N. G. Chu, A. Y. Cho, *Intersubband absorption at $\lambda \sim 1.55 \mu\text{m}$ in well- and modulation-doped GaN/AlGa_N multiple quantum wells with superlattice barriers*, Appl. Phys. Lett. **77**, 3722 (2000)
- [160] N. Iizuka, K. Kaneko, N. Suzuki, *Near-infrared intersubband absorption in GaN/AlN quantum wells grown by molecular beam epitaxy*, Appl. Phys. Lett. **81**, 1803 (2002)
- [161] E. Baumann, F. R. Giorgetta, D. Hofstetter, S. Leconte, F. Guillot, E. Bellet-Amalric, E. Monroy, *Electrically adjustable intersubband absorption of a GaN/AlN superlattice grown on a transistorlike structure*, Appl. Phys. Lett. **89**, 101121 (2006)
- [162] H. Sodabanlu, J.-S. Yang, M. Sugiyama, Y. Shimogaki, Y. Nakano, *Intersubband Transition at $1.52 \mu\text{m}$ in GaN/AlN Multiple Quantum Wells Grown by Metal Organic Vapor Phase Epitaxy*, Appl. Phys. Express **2**, 061002 (2009)

Danksagung

Das Gelingen einer solchen Arbeit ist nur schwer als Einzelkämpfer zu realisieren, sondern hängt entscheidend von der guten Zusammenarbeit mit anderen Personen ab. Neben der eigenen Arbeitsgruppe sind das vor allem die Gruppen von Prof. Dr. Andreas Hangleiter (TU Braunschweig), Prof. Dr. Norbert Esser (ISAS Berlin), Prof. Dr. Martin Eickhoff (TU München, Justus-Liebig-Universität Gießen), Prof. Dr. Alois Krost (Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg) und Prof. Dr. Oliver Ambacher (Zentrum für Mikro- und Nanotechnologien der TU Ilmenau, Fraunhofer-IAF Freiburg).

Ich möchte Prof. Dr. Gerhard Gobsch danken. Er ermöglichte es mir, meine Forschungen in seinem Fachgebiet durchzuführen und zeigte stetes Interesse am Fortgang der Arbeit.

Der größte Dank gebührt Prof. Dr. Rüdiger Goldhahn. Mit seiner langjährigen Erfahrung auf dem Gebiet der optischen Spektroskopie war er ein exzellenter fachlicher Betreuer, der mir in kritischen Diskussionen zu diversen Fragestellungen stets zur Seite stand.

Dr. Andreas T. Winzer, Pascal Schley, Thomas Klein und Marcus Röppischer waren hervorragende Mitstreiter bei der Erforschung von Nitridhalbleitern. Wir haben viele fachliche Diskussionen geführt und Meßmarathons im Labor überstanden. Die von Dr. Andreas T. Winzer geschriebene Routine zum selbstkonsistenten Lösen von Schrödinger- und Poissongleichung war ein wichtiges Werkzeug für meine Arbeit.

Danken möchte ich ebenfalls Dr. Christoph Cobet, Munise Rakel und Christoph Werner für die Einweisung und tatkräftige Unterstützung während der langen Meßtage und -nächte am BESSY.

Um gute Experimente durchführen zu können, benötigt man auch gute Proben. Für die Z-, MD-, BS-, B-, M- und FR-Proben bin ich Dr. Katja Tonisch, Dr. Volker Cimalla, PD Dr. Armin Dadgar, Matthias Wieneke, PD Dr. Uwe Rossow, Dr. Daniel Fuhrmann,

Dr. Eberhard Richter, Florian Furtmayr und Stefan Müller dankbar.

Dank möchte ich ebenso denjenigen aussprechen, die mir wertvolle Zusatzinformationen zu den Proben geben konnten. Dr. Jürgen Bläsing lieferte die Röntgendaten zu den MD-Proben, Lutz Kirste die der FR-Proben. Dr. Katja Tonisch führte die CV-Messungen an den Z-Proben durch. Die elektrischen Messungen an den FR-Proben stammen von Patrick Waltereit und Klaus Köhler. Christoph Werner nahm die RAS-Messungen vor und Dr. Martina Baeumler stellte Ellipsometriedaten der FR-Proben zur Verfügung.

Dr. Katja Tonisch, Prof. Dr. Martin Eickhoff und Florian Furtmayr bin ich für die Unterstützung beim Aufbringen von Kontakten auf die Proben verbunden.

Den noch nicht genannten Mitarbeitern des Fachgebietes Experimentalphysik I danke ich für die Hilfe bei den kleinen Dingen im Physikeralltag und die angenehme Arbeitsatmosphäre.

Erklärung

(gemäß Anlage 1 der Promotionsordnung der TU Ilmenau)

Ich versichere, daß ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus anderen Quellen direkt oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet.

Bei der Auswahl und Auswertung folgenden Materials haben mir die nachstehend aufgeführten Personen in der jeweils beschriebenen Weise entgeltlich/unentgeltlich geholfen:

– nicht zutreffend

Weitere Personen waren an der inhaltlich-materiellen Erstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Insbesondere habe ich hierfür nicht die entgeltliche Hilfe von Vermittlungs- bzw. Beratungsdiensten (Promotionsberater oder anderer Personen) in Anspruch genommen. Niemand hat von mir unmittelbar oder mittelbar geldwerte Leistungen für Arbeiten erhalten, die im Zusammenhang mit dem Inhalt der vorgelegten Dissertation stehen.

Die Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer Prüfungsbehörde vorgelegt.

Ich bin darauf hingewiesen worden, daß die Unrichtigkeit der vorstehenden Erklärung als Täuschungsversuch angesehen wird und den erfolglosen Abbruch des Promotionsverfahrens zur Folge hat.

Ilmenau,

Dipl.-Ing. Carsten Buchheim